

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

ALESSANDRA HOERNING

PROPRIEDADES TERMOFÍSICAS DE SOLUÇÕES AQUOSAS DE LÍQUIDOS  
IÔNICOS: ELEVAÇÃO DO PONTO DE EBULIÇÃO, VISCOSIDADE E DENSIDADE

CURITIBA

2015

ALESSANDRA HOERNING

PROPRIEDADES TERMOFÍSICAS DE SOLUÇÕES AQUOSAS DE LÍQUIDOS  
IÔNICOS: ELEVAÇÃO DO PONTO DE EBULIÇÃO, VISCOSIDADE E DENSIDADE

Dissertação apresentada ao curso de Pós-graduação em Engenharia Química, Área de Concentração em Termodinâmica Aplicada e Engenharia de Processos de Separação, Setor de Tecnologia, Universidade Federal do Paraná, como parte das exigências para obtenção do título de Mestre em engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. Fernando Augusto Pedersen Voll.

Coorientador: Prof. Dr. Marcos Lúcio Corazza.

CURITIBA

2015

---

H694p

Hoerning, Alessandra

Propriedades termofísicas de soluções aquosas de líquidos iônicos :  
elevação do ponto de ebulição, viscosidade e densidade/ Alessandra  
Hoerning. – Curitiba, 2015.  
98 f. : il. color. ; 30 cm.

Dissertação - Universidade Federal do Paraná, Setor de Tecnologia,  
Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, 2015.

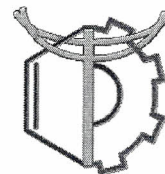
Orientador: Fernando Augusto Pedersen Voll – Co-orientador: Marcos  
Lúcio Corazza.

Bibliografia: p. 82-85.

1. Líquidos - Propriedades. 2. Ionização. 3. Evaporadores. I. Universidade  
Federal do Paraná. II. Voll, Fernando Augusto Pedersen. III. Corazza, Marcos  
Lúcio. IV. Título.

CDD: 541.0422

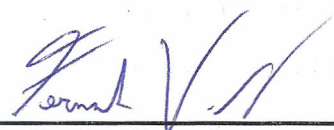
---



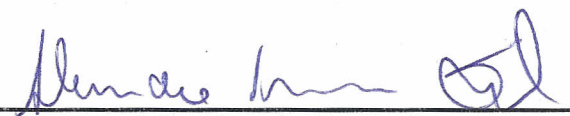
## ATA DE DEFESA DE DISSERTAÇÃO

Aos treze dias do mês de março de 2015, no Auditório Inferior do Prédio da Engenharia Química no Centro Politécnico – UFPR foi instalada pelo Dr. Fernando Augusto Pedersen Voll, professor do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, a Banca Examinadora para a septuagésima primeira defesa de dissertação de mestrado na área de concentração: Desenvolvimento de Processos Químicos. Estiveram presentes no ato, professores, alunos e visitantes. A Banca Examinadora, atendendo à determinação do colegiado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, foi constituída pelos professores doutores: Fernando Augusto Pedersen Voll (PPGEQ/UFPR), Alexandre Ferreira Santos (PPGEQ/UFPR) e João Paulo Bender (Engenharia Ambiental /UFFS). Às 09h30min, a banca iniciou os trabalhos, convidando a candidata **Alessandra Hoerning** a fazer a apresentação da dissertação de mestrado intitulada *“Propriedades termofísicas de soluções aquosas de líquidos iônicos: elevação do ponto de ebulição, viscosidade e densidade”*. Encerrada a apresentação, iniciou-se a fase de arguição pelos membros participantes. Tendo em vista a dissertação e a arguição, a banca decidiu pela APROVAÇÃO da candidata, (de acordo com a determinação dos artigos 68º e 69º da Resolução 65/09 – CEPE/UFPR de 30.10.2009).

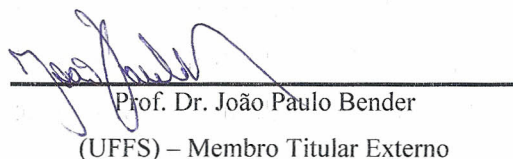
Curitiba, 13 de março de 2015.



Prof. Dr. Fernando Augusto Pedersen Voll  
(PPGEQ/UFPR) – Orientador



Prof. Dr. Alexandre Ferreira Santos  
(PPGEQ/UFPR) – Membro Titular Interno



Prof. Dr. João Paulo Bender  
(UFFS) – Membro Titular Externo

*Aos meus pais Renato e Dorita, meu esposo Gustavo,  
E meu filho Vitor que enche meus dias de alegria.*

## **AGRADECIMENTOS**

À Deus por estar presente em minha vida.

À meus pais por todo amor, carinho e contribuição na minha formação.

À meu orientador Prof. Dr. Fernando Augusto Pedersen Voll por toda dedicação e apoio para o desenvolvimento desse projeto.

À todos os professores do curso de Pós-graduação em Engenharia Química da Universidade Federal do Paraná que contribuíram com essa formação.

À Universidade Estadual de Maringá (UEM) pela disponibilização das amostras de líquidos iônicos utilizados neste trabalho.

À CAPES pelo apoio financeiro.

## RESUMO

O despertar nos últimos anos da preocupação ambiental provocou a busca por uma nova classe de solventes, menos tóxicos e de baixo impacto ambiental. Dentre os inúmeros solventes alternativos explorados, os líquidos iônicos apresentam um futuro promissor para a indústria química, por possuírem propriedades bastante atrativas, tais como baixa pressão de vapor, estabilidade térmica e química, baixa ou nenhuma inflamabilidade e a possibilidade de serem reciclados e reutilizados. O objetivo deste trabalho é a determinação experimental da viscosidade, densidade e elevação do ponto de ebulição (EPE) de soluções aquosas de LI derivados da base catiônica Dietanolamina (DEA), nas bases aniônicas os ácidos acético, propanóico, butanóico e pentanóico. Os dados da EPE aliado a outras propriedades termofísicas é fundamental para projeto de evaporadores visando a reciclagem dos LI. Para avaliação do comportamento reológico dos líquidos iônicos puros e suas soluções aquosas foi utilizado um viscosímetro de cilindros concêntricos, na faixa de temperatura de 293,15-323,15 K e frações mássicas de LI de 0,25-1. Para validação do procedimento foi utilizado o glicerol. As análises de densidade foram realizadas em um densímetro digital adequado para medidas de densidade de líquidos, na faixa de temperatura de 293,15-323,15 K e frações mássicas de LI de 0,25-1. O procedimento de medição da densidade foi validado com água pura em diferentes temperaturas e com uma mistura de etanol + glicerol em diferentes concentrações. Os ensaios para estimativa das temperaturas de ebulição foram realizadas em uma unidade experimental composta de um recipiente esférico de vidro, para a alimentação da solução, uma manta de aquecimento e um condensador. O sistema foi conectado a uma bomba de vácuo e operado com pressões inferiores a pressão atmosférica. A metodologia de levantamento dos dados experimentais foi validada através de ensaios de determinação da temperatura de ebulição da água pura em diferentes pressões e de uma solução de etanol e glicerol com diferentes concentrações. Os ensaios de determinação da elevação do ponto de ebulição foram realizados nas pressões de 80–900 mBar e frações mássicas de LI no intervalo de 0,40-0,95. Observou-se um aumento da temperatura de ebulição da solução para maiores frações mássicas do soluto. Os resultados obtidos foram utilizados para ajustar parâmetros de modelos matemáticos para o comportamento da viscosidade, densidade e ponto de ebulição.

Palavras-chave: Líquido iônico, água, viscosidade, densidade e elevação do ponto de ebulição.

## ABSTRACT

The recent years environmental concerns led to the search for a new class of solvents, less toxic and with low environmental impact. Among the various alternatives solvents explored, ionic liquids (IL) have a promising future for the chemical industry, because they have very attractive properties such as low vapor pressure, thermal and chemical stability, low or no flammability and possibility of being recycled and reused. The objective of this work is the experimental and theoretical determination of the viscosity, density and boiling point elevation (BPE) of mixtures of water and ILs derived from diethanolamine (base) and acetic, propanoic, butanoic and pentanoic acids. The BPE data combined with other thermo-physical properties are essential for processes involving evaporators targeting the recycling of IL. To evaluate the rheological behavior of pure ionic liquids and their aqueous solutions was used concentric cylinder viscometer, in the temperature range of 293.15-323.15 K and mass fractions 0.25-1. To validate the procedure was used glycerol. Density analyzes were carried out in an appropriate digital hydrometer for liquid density measurements in the temperature range of 293.15-323.15 K and mass fractions of IL 0.25-1. The density measurement procedure has been validated with pure water at different temperatures and with a mixture of ethanol and glycerol in different concentrations. Boiling points determination were performed on an experimental unit consisted of a spherical glass container for feeding the solution, a heating mantle and a condenser. The system was connected to a vacuum pump for obtaining data below the atmospheric pressure. The survey data methodology was validated by means of experimental tests to determine the boiling point of pure water at different pressures and a solution of ethanol and glycerol with different concentrations. Assays for determining the aqueous solutions boiling point elevation will be performed in 80 - 900 mBar and 0,40-0,95 (w/w) mass fraction of IL in water. There was an increase in the boiling temperature of the solution to larger mass fraction of the solute. The results were used to adjust parameters of mathematical models for the behavior of viscosity, density and boiling point.

Keywords: Ionic liquid, water, viscosity, density, boiling point elevation.



## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

FIGURA 1 - PRINCIPAIS CÁTIOS E ÂNIOS UTILIZADOS .....	20
FIGURA 2 - ESTRUTURA DO CÁTION E ÂNIOS UTILIZADOS NESTE TRABALHO .....	21
FIGURA 3 - COMPORTAMENTO REOLÓGICO DOS FLUIDOS INDEPENDENTE DO TEMPO .....	22
FIGURA 4 - VISCOSIDADES PARA MISTURAS DE LÍQUIDOS IÔNICOS PARA: TEAA A 298.15 K (O), TEAA A 303.15 K ( $\Delta$ ) E TEAA A 308.15 K ( $\square$ ) .....	23
FIGURA 5 - VISCOSIDADE EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA PARA VÁRIOS GRUPOS DE LÍQUIDOS IÔNICOS.....	24
FIGURA 6 - CURVAS DE VISCOSIDADES EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA (278.15-338.15 K): (O) 2-HIDROXIETILAMONIO PENTANOATO (2-HEAPE), ( $\square$ ) 2-HIDROXIDIETILAMONIO PENTANOATO (2-HDEAPE) E ( $\Delta$ )2-HIDROXITRIETILAMONIO PENTANOATO (2-HTEAPE) .....	26
FIGURA 7 - DENSIDADES PARA MISTURAS DE LÍQUIDOS IÔNICOS PARA: TEAA A 298,15 K (O), TEAA A 303,15 K ( $\Delta$ ) E TEAA A 308,15 K ( $\square$ ) .....	27
FIGURA 8 - DENSIDADE EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA PARA VÁRIOS GRUPOS DE LÍQUIDOS IÔNICOS.....	28
FIGURA 9 - DENSIDADE EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA A PRESSÃO AMBIENTE PARA LÍQUIDOS IÔNICOS PUROS: M-2-HEAA ( $\square$ ), M-2-HEAB (O), M-2-HEAH ( $\diamond$ ), M-2HE2AB (X) E N-(2-HE)EDAB (+).....	28
FIGURA 10 - CURVA DE DENSIDADE $\rho$ (g/cm <sup>3</sup> ) DOS LIPS NAS TEMPERATURAS DE 20 °C A 80 °C: (O) 2-HIDROXI TRIETANOLAMINA ACETATO (2HTEAA), ( $\diamond$ ) 2-HIDROXI TRIETANOLAMINA PROPIONATO (2HTEAPR), ( $\square$ ) 2-HIDROXI TRIETANOLAMINA BUTANOATO (2HTEAB) E ( $\Delta$ ) 2-HIDROXI TRIETANOLAMINA PENTANOATO.....	29
FIGURA 11 - CURVAS DE DENSIDADE EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA (278.15-338.15 K): (O) 2-HIDROXIETILAMONIO PENTANOATO (2-HEAPE), ( $\square$ ) 2-HIDROXIDIETILAMONIO PENTANOATO (2-HDEAPE) E ( $\Delta$ )2-HIDROXITRIETILAMONIO PENTANOATO (2-HTEAPE) .....	30
FIGURA 12 - COMPARAÇÃO DE DENSIDADES DE MISTURA BINÁRIAS DE LÍQUIDO IÔNICO(1) + ÁGUA(2): ( $\nabla$ ) N2AC E ( $\Delta$ )N3AC .....	31
FIGURA 13 - EFEITO DA PRESENÇA DE NaCl NA PRESSÃO DE SATURAÇÃO DA ÁGUA AVALIADA ENTRE AS PRESSÕES DE 14 A 92 KPa. ....	32
FIGURA 14 - ELEVAÇÃO DO PONTO DE EBULIÇÃO DE EXTRATOS DE CAFÉ EM DIFERENTES FRAÇÕES MÁSSICAS DE SÓLIDOS .....	33

FIGURA 15 - (1) TUBO DE TRÊS BOCAS CONTENDO A BASE DIETANOLAMINA, (2) FUNIL DE SEPARAÇÃO CONTENDO ÁCIDO ORGÂNICO, (3) SISTEMA DE AGITAÇÃO MECÂNICA, (4) REFLUXO, (5) TERMÔMETRO, (6) BANHO TERMOSTATIZADO, (7) AGITAÇÃO MAGNÉTICA. ....	37
FIGURA 16 - REÔMETRO ROTACIONAL DE CILINDROS CONCÊNTRICOS DO TIPO SEARLE (O CILINDRO INTERNA GIRA E O EXTERNO É FIXO): (A) VISTA LATERAL; (B) VISTA SUPERIOR.....	39
FIGURA 17 - PERFIL DE VELOCIDADES EM UM REÔMETRO DE CILINDROS CONCÊNTRICOS .....	39
FIGURA 18 - RESULTADOS EXPERIMENTAIS DO VISCOSÍMETRO EM COMPARAÇÃO COM OS RESULTADOS TEÓRICOS (modelo de Newton) CALCULADOS COM O AUXÍLIO DO MATLAB: (x) GLICEROL A 298,15 K, (◊) GLICEROL A 323,15 K E ( - ) modelo.....	41
FIGURA 19 - RESULTADOS DA DENSIDADE EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA PARA A ÁGUA: (◻) ESTE TRABALHO, (◊) LEMMON;MCLINDEN;FRIEND .....	44
FIGURA 20 - RESULTADOS DA DENSIDADE DA MISTURA BINÁRIA GLICEROL(1) + ETANOL(2) NA TEMPERATURA DE 303,15 K: (◻) ESTE TRABALHO, (◊) FAGGION .....	45
FIGURA 21 - TEMPERATURA DE EBULIÇÃO DA ÁGUA EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA: (◻) ESTE TRABALHO, (-) LEMMON;MCLINDEN;FRIEND .	46
FIGURA 22 - TEMPERATURA DE EBULIÇÃO DO SISTEMA BINÁRIO ETANOL(1) + GLICEROL(2) À PRESSÃO ATMOSFÉRICA: (◻) ESTE TRABALHO, (X) FAGGION.....	47
FIGURA 23 - DIAGRAMA ESQUEMÁTICO DO APARELHO UTILIZADO PARA MEDIDA DO PONTO DE EBULIÇÃO .....	48
FIGURA 24 - CURVAS DE VISCOSIDADE EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA PARA OS LÍQUIDOS IÔNICOS PUROS: (◊) 2-HIDROXI DIETILAMONIO ACETATO (2HDEAA); (Δ) 2-HIDROXI DIETILAMONIO PROPINOATO (2HDEAPR); (◻) 2-HIDROXI DIETILAMONIO BUTANOATO (2HDEAB); (X) 2-HIDROXI DIETILAMONIO PENTANOATO (2HDEAPE).....	51
FIGURA 25 - RESULTADOS DA VISCOSIDADE PARA A MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAA(2): (◊) 293,15 K, (◻) 303,15 K, (Δ) 313,15 K E (X) 323,15 K...	53
FIGURA 26 - RESULTADOS DA VISCOSIDADE PARA A MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAPR(2): (◊) 293,15 K, (◻) 303,15 K, (Δ) 313,15 K E (X) 323,15 K.	54
FIGURA 27 - RESULTADOS DA VISCOSIDADE PARA A MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAB(2): (◊) 293,15 K, (◻) 303,15 K, (Δ) 313,15 K E (X) 323,15 K ...	54
FIGURA 28 - RESULTADOS DA VISCOSIDADE PARA A MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAPE(2): (◊) 293,15 K, (◻) 303,15 K, (Δ) 313,15 K E (X) 323,15 K.	55

FIGURA 29 - RESULTADOS DA VISCOSIDADE PARA A MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAA(2) EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA: (O) X <sub>2</sub> =1.0, (◊) X <sub>2</sub> =0.85, (◻) X <sub>2</sub> =0.70, (Δ) X <sub>2</sub> =0.55, (X) X <sub>2</sub> =0.40, (⋈) X <sub>2</sub> =0.25 .....	55
FIGURA 30 - RESULTADOS DA VISCOSIDADE PARA A MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAPR(2) EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA: (Δ) X <sub>2</sub> =1.0, (X) X <sub>2</sub> =0.85, (⋈) X <sub>2</sub> =0.70, (O) X <sub>2</sub> =0.55, (◻) X <sub>2</sub> =0.40, (◊) X <sub>2</sub> =0.25.....	56
FIGURA 31 - RESULTADOS DA VISCOSIDADE PARA A MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAB(2) EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA: (O) X <sub>2</sub> =1.0, (◊) X <sub>2</sub> =0.85, (◻) X <sub>2</sub> =0.70, (Δ) X <sub>2</sub> =0.55, (X) X <sub>2</sub> =0.40, (⋈) X <sub>2</sub> =0.25 .....	56
FIGURA 32 - RESULTADOS DA VISCOSIDADE PARA A MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAPE(2) EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA: (O) X <sub>2</sub> =1.0, (X) X <sub>2</sub> =0.85, (◊) X <sub>2</sub> =0.70, (◻) X <sub>2</sub> =0.55, (Δ) X <sub>2</sub> =0.40, (⋈) X <sub>2</sub> =0.25 .....	57
FIGURA 33 - VISCOSIDADE (cP) PARA A MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAA(2) EM FUNÇÃO DA FRAÇÃO MÁSSICA (X <sub>2</sub> ) E DA TEMPERATURA (K) .....	58
FIGURA 34 - COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS (◊) COM O MODELO PROPOSTO (-) PARA A MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAA(2).....	58
FIGURA 35 - VISCOSIDADE (cP) PARA A MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAPr(2) EM FUNÇÃO DA FRAÇÃO MÁSSICA (X <sub>2</sub> ) E DA TEMPERATURA (K) .....	59
FIGURA 36 - COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS (◊) COM O MODELO PROPOSTO (-) PARA A MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAPr(2). ....	59
FIGURA 37 -VISCOSIDADE (cP) PARA A MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAB(2) EM FUNÇÃO DA FRAÇÃO MÁSSICA (X <sub>2</sub> ) E DA TEMPERATURA (K) .....	60
FIGURA 38 - COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS (◊) COM O MODELO PROPOSTO (-) PARA A MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAB(2).....	60
FIGURA 39 -VISCOSIDADE (cP) PARA A MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAPe(2) EM FUNÇÃO DA FRAÇÃO MÁSSICA (X <sub>2</sub> ) E DA TEMPERATURA (K) .....	60
FIGURA 40 - COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS (◊) COM O MODELO PROPOSTO (-) PARA A MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAPe(2).....	60
FIGURA 41 - RESULTADOS DA DENSIDADE DOS LÍQUIDOS IÔNICOS PUROS: (◊) 2HDEAA, (◻) 2HDEAPR, (Δ) 2HDEAB, (X) 2HDEAPE .....	62
FIGURA 42 - RESULTADOS DA DENSIDADE DOS LÍQUIDOS IÔNICOS COM A MESMA BASE ANIÔNICA - ACETATO: (◊) m-2HEAA(*), (◻) 2HDEAA, (Δ) 2HTEAA(**) .....	63
FIGURA 43 - RESULTADOS DA DENSIDADE DOS LÍQUIDOS IÔNICOS COM A MESMA BASE ANIÔNICA - PROPINOATO: (◊) m-2HEAPR(*), (◻) 2HDEAPR, (Δ) 2HTEAPR(**).....	63

FIGURA 44 - RESULTADOS DA DENSIDADE DOS LÍQUIDOS IÔNICOS COM A MESMA BASE ANIÔNICA - BUTANOATO: (◊) m-2HEAB(*), (◻) 2HDEAB, (Δ) 2HTEAB(**) .....	64
FIGURA 45 - RESULTADOS DA DENSIDADE DOS LÍQUIDOS IÔNICOS COM A MESMA BASE ANIÔNICA - PENTANOATO: (◊) m-2HEAPE(*), (◻) 2HDEAPE, (Δ) 2HTEAPE(**).....	64
FIGURA 46 - RESULTADOS DA DENSIDADE PARA A MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAA(2) NAS TEMPERATURAS DE: (◊) 293,15 K, (◻)303,15 K, (Δ) 313,15 K, (X)323,15 K.....	65
FIGURA 47 - RESULTADOS DA DENSIDADE PARA A MISTURA BINÁRIA 2ÁGUA(1) + HDEAPR(2) NAS TEMPERATURAS DE: (◊) 293,15 K, (◻)303,15 K, (Δ) 313,15 K, (X)323,15 K.....	65
FIGURA 48 - RESULTADOS DA DENSIDADE PARA A MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAB(2) NAS TEMPERATURAS DE: (◊) 293,15 K, (◻)303,15 K, (Δ) 313,15 K, (X)323,15 K.....	66
FIGURA 49 - RESULTADOS DA DENSIDADE PARA A MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAPE(2) NAS TEMPERATURAS DE: (◊) 293,15 K, (◻)303,15 K, (Δ) 313,15 K, (X)323,15 K.....	66
FIGURA 50 - DENSIDADE (g/cm <sup>3</sup> ) PARA A MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAA(2) EM FUNÇÃO DA FRAÇÃO MÁSSICA (X <sub>2</sub> ) E DA TEMPERATURA (K). ....	67
FIGURA 51 - COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS (◊) COM O MODELO PROPOSTO (-) PARA A MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAA(2).....	68
FIGURA 52 -DENSIDADE (cP) PARA A MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAPr(2) EM FUNÇÃO DA FRAÇÃO MÁSSICA (X <sub>2</sub> ) E DA TEMPERATURA (K) .....	68
FIGURA 53 - COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS (◊) COM O MODELO PROPOSTO (-) PARA A MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAPr(2). ....	69
FIGURA 54 - DENSIDADE (g/cm <sup>3</sup> ) PARA A MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAB(2) EM FUNÇÃO DA FRAÇÃO MÁSSICA (X <sub>2</sub> ) E DA TEMPERATURA (K) .....	69
FIGURA 55 - COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS (◊) COM O MODELO PROPOSTO (-) PARA A MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAB(2).....	70
FIGURA 56 - DENSIDADE (cP) PARA A MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAPe(2) EM FUNÇÃO DA FRAÇÃO MÁSSICA (X <sub>2</sub> ) E DA TEMPERATURA (K) .....	70
FIGURA 57 - COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS (◊) COM O MODELO PROPOSTO (-) PARA A MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAPe(2).....	70
FIGURA 58 - ELEVAÇÃO DO PONTO DE EBULIÇÃO DA SOLUÇÃO ÁGUA(1) + LÍQUIDO IÔNICO(2) EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA DE EBULIÇÃO DA ÁGUA PURA (DIAGRAMA DE DUHRING) PARA X <sub>1</sub> =0,05 : (◊) 2HDEAA, (◻) 2HDAPR, (Δ) 2HDEAB, (X) 2HDEAPR .....	72

FIGURA 59 - TEMPERATURA DE EBULIÇÃO DA MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAA(2) NAS PRESSÕES DE: (ж) 121 mBar, (+) 258 mBar, (O) 418 mBar, (X) 579 mBar, (Δ) 741 mBar E (□) 918 mBar .....73

FIGURA 60 - TEMPERATURA DE EBULIÇÃO DA MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAPR(2) NAS PRESSÕES DE: (ж) 121 mBar, (+) 258 mBar, (O) 418 mBar, (X) 579 mBar, (Δ) 741 mBar E (□) 918 mBar .....73

FIGURA 61 - TEMPERATURA DE EBULIÇÃO DA MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAB(2) NAS PRESSÕES DE: (ж) 121 mBar, (+) 258 mBar, (O) 418 mBar, (X) 579 mBar, (Δ) 741 mBar E (□) 918 mBar .....74

FIGURA 62 - TEMPERATURA DE EBULIÇÃO DA MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAPE(2) NAS PRESSÕES DE: (ж) 121 mBar, (+) 258 mBar, (O) 418 mBar, (X) 579 mBar, (Δ) 741 mBar E (□) 918 mBar .....74

FIGURA 63 - DIAGRAMA DE DUHRING DA MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAA(2): (O)  $X_2=0.95$ , (ж)  $X_2=0.9$ , (X)  $X_2=0.85$ , (Δ)  $X_2=0.70$ , (□)  $X_2=0.55$ , (◇)  $X_2=0.40$  .....75

FIGURA 64 - DIAGRAMA DE DUHRING DA MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAPR(2): (O)  $X_2=0.95$ , (ж)  $X_2=0.9$ , (X)  $X_2=0.85$ , (Δ)  $X_2=0.70$ , (□)  $X_2=0.55$ , (◇)  $X_2=0.40$  .....75

FIGURA 65 - DIAGRAMA DE DUHRING DA MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAB(2): (O)  $X_2=0.95$ , (ж)  $X_2=0.9$ , (X)  $X_2=0.85$ , (Δ)  $X_2=0.70$ , (□)  $X_2=0.55$ , (◇)  $X_2=0.40$  .....76

FIGURA 66 - DIAGRAMA DE DUHRING DA MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAPE(2): (O)  $X_2=0.95$ , (ж)  $X_2=0.9$ , (X)  $X_2=0.85$ , (Δ)  $X_2=0.70$ , (□)  $X_2=0.55$ , (◇)  $X_2=0.40$  .....76

FIGURA 67 - COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS DO PONTO DE EBULIÇÃO DA MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAA(2) E MODELOS NRTL, PARA AS PRESSÕES: (◇) 121 mBar, (□) 258 mBar, (Δ) 418 mBar, (X) 579 mBar, (ж) 741 mBar E (O) 918 mBar.....77

FIGURA 68 - COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS DO PONTO DE EBULIÇÃO DA MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAPr(2) E MODELOS NRTL, PARA AS PRESSÕES: (◇) 121 mBar, (□) 258 mBar, (Δ) 418 mBar, (X) 579 mBar, (ж) 741 mBar E (O) 918 mBar.....78

FIGURA 69 - COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS DO PONTO DE EBULIÇÃO DA MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAB(2) E MODELOS NRTL, PARA AS PRESSÕES: (◇) 121 mBar, (□) 258 mBar, (Δ) 418 mBar, (X) 579 mBar, (ж) 741 mBar E (O) 918 mBar.....78

FIGURA 70 - COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS DO PONTO DE EBULIÇÃO DA MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAPE(2) E MODELOS NRTL, PARA AS PRESSÕES: (◇) 121 mBar, (□) 258 mBar, (Δ) 418 mBar, (X) 579 mBar, (ж) 741 mBar E (O) 918 mBar.....79

## LISTA DE TABELAS

TABELA 1 - PRINCIPAIS VANTAGENS E DESVANTAGENS DOS LÍQUIDOS IÔNICOS .....	19
TABELA 2 - COMPARATIVO ENTRE SOLVENTES ORGÂNICOS E LÍQUIDOS IÔNICOS .....	19
TABELA 3 - MODELOS REOLÓGICOS PARA DESCREVER O COMPORTAMENTO DE FLUIDOS INDEPENDENTES DO TEMPO.....	23
TABELA 4 - DADOS EXPERIMENTAIS EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA PARA CADA SÍNTESE DE LÍQUIDOS IÔNICOS. VALORES EM $\mu\text{mPa.s}$ .....	25
TABELA 5 - RESULTADO DE VISCOSIDADE DOS LIPS. VALORES EM $\mu\text{mPa.s}$	25
TABELA 6 - DADOS EXPERIMENTAIS DE DENSIDADE EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA PARA CADA SÍNTESE DE LÍQUIDOS IÔNICOS. VALORES EM $\text{g/cm}^3$ .....	29
TABELA 7 - EXPERIMENTAIS PARA LÍQUIDOS IÔNICOS PUROS A 298.15 K ....	30
TABELA 8 - EQUILÍBRIO LÍQUIDO-VAPOR (FRAÇÃO MOLAR) E COEFICIENTE DE ATIVIDADE PARA O SISTEMA BINÁRIO DE ACETATO DE METILA (1) + 2-HE <sub>2</sub> AB(2).....	34
TABELA 9 – REAGENTES UTILIZADOS NESTE TRABALHO.....	37
TABELA 10 - MODELOS SELECIONADOS PARA ESTUDO .....	40
TABELA 11 - VALIDAÇÃO COM GLICEROL.....	42
TABELA 12 – PESO MOLECULAR DOS LÍQUIDOS IÔNICOS.....	49
TABELA 13 - PORCENTAGEM DE ÁGUA PRESENTE NOS LÍQUIDOS IÔNICOS	50
TABELA 14 - VISCOSIDADE DOS LÍQUIDOS IÔNICOS PUROS À TEMPERATURA AMBIENTE (293,15 K) .....	51
TABELA 15 - COMPARATIVO DOS RESULTADOS DE VISCOSIDADES DOS LÍQUIDOS IÔNICOS PUROS EM FUNÇÃO DA CADEIA CATIÔNICA A TEMPERATURA DE 323,15 K .....	53
TABELA 16 – VISCOSIDADE: VALOR DAS CONSTANTES PARA MISTURA DE ÁGUA + LI, E SUAS RESPECTIVAS CORRELAÇÕES.....	56
TABELA 17 - DENSIDADE DOS LÍQUIDOS IÔNICOS PUROS À TEMPERATURA AMBIENTE (293,15 K) .....	62

TABELA 18 – DENSIDADE: VALOR DAS CONSTANTES PARA MISTURA DE  
ÁGUA + LI, E SUAS RESPECTIVAS CORRELAÇÕES.....66

TABELA 19 – PARÂMETROS PARA AJUSTE GLOBAL DO MODELO NRTL, NA  
FAIXA DE TEMPERATURA DE 293.15 K A 323.15 K, COM 42 PONTOS  
EXPERIMENTAIS .....77

## LISTA DE SIMBOLOS

$\mu$  – VISCOSIDADE

$\sigma$  – TENSÃO DE CISALHAMENTO

$\gamma$  – TAXA DE DEFORMAÇÃO

$\omega$  – VELOCIDADE ANGULAR

$\rho$  – DENSIDADE

$X_1$  – FRAÇÃO MÁSSICA DO COMPONENTE 1

$X_2$  – FRAÇÃO MÁSSICA DO COMPONENTE 2

$T$  – TEMPERATURA

$P$  – PRESSÃO

$\gamma_1$  - COEFICIENTE DE ATIVIDADE



## SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO E JUSTIFICATIVA.....	16
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA .....	18
2.1 LÍQUIDOS IÔNICOS .....	18
2.1.1 Síntese dos líquidos iônicos.....	21
2.2 VISCOSIDADE .....	22
2.3 DENSIDADE .....	27
2.4 ELEVAÇÃO DO PONTO DE EBULIÇÃO .....	31
3 OBJETIVOS .....	35
3.1 OBJETIVOS ESPECÍFICOS.....	35
4 MATERIAIS E MÉTODOS .....	36
4.1 PURIFICAÇÃO DOS LIS PELO MÉTODO DE ROTA EVAPORAÇÃO.....	38
4.2 TEOR DE ÁGUA .....	38
4.3 VISCOSIDADE .....	38
4.3.1 Validação do método .....	41
4.4 DENSIDADE .....	42
4.4.1 Validação do método.....	43
4.5 ELEVAÇÃO DO PONTO DE EBULIÇÃO .....	45
4.5.1 Curva de calibração do sensor de temperatura e do transdutor de pressão....	45
4.5.2 Validação do procedimento de medição do ponto de ebulição.....	46
4.5.4 Modelagem da elevação do ponto de bolha de soluções de água e líquido iônico.....	49
5.1 PURIFICAÇÃO .....	51
5.2 TEOR DE ÁGUA .....	51
5.3 VISCOSIDADE .....	51
5.3.1 Líquidos iônicos .....	51
5.3.2 Modelagem .....	57
5.4 DENSIDADE .....	62
5.4.1 Líquidos iônicos .....	62
5.4.2 Modelagem .....	66
5.5 ELEVAÇÃO DO PONTO DE EBULIÇÃO .....	71
5.5.2 Modelagem da elevação do ponto de bolha de soluções de água e líquido iônico.....	77
CONCLUSÃO .....	80
REFERENCIAS.....	82
ANEXOS .....	86

## 1 INTRODUÇÃO E JUSTIFICATIVA

Os solventes apresentam grande importância nos processos químicos e desempenham papel fundamental para o crescimento e desenvolvimento industrial. Em geral os solventes são compostos orgânicos, voláteis, inflamáveis, e apresentam risco à saúde e ao meio ambiente.

Resultante deste crescimento e também do despertar nos últimos anos da preocupação ambiental, vemos hoje a necessidade de substituir estes solventes “comuns” por outros menos tóxicos e de baixo impacto ambiental.

A principal razão para substituição dos solventes é evitar o impacto ambiental decorrente da perda acidental de compostos orgânicos voláteis durante o manuseio, uso em processo, reação e separação. Fatores de saúde e segurança também são de grande preocupação (CLARK; TAVENER, 2007).

Frente a esta nova demanda, cresceu, a partir do ano de 2000, o número de pesquisas e patentes com solventes alternativos. Dentre os inúmeros solventes alternativos explorados, os líquidos iônicos apresentam um futuro promissor para a indústria química.

O grande interesse por líquido iônico (LI) reside no fato de possuírem várias propriedades bastante atrativas, tais como baixa pressão de vapor, estabilidade térmica e química, baixa ou nenhuma inflamabilidade, alta condutividade iônica, uma ampla janela de potencial eletroquímico e, ainda, a capacidade de atuarem como catalisadores e de serem reciclados e reutilizados (ANDRADE, 2009). O fato do LI ser não volátil, além de apresentar estabilidade térmica e química, oferece condições de ser reciclado e reutilizado. Apesar do aumento significativo de pesquisas envolvendo LI nos últimos anos, observam-se poucos estudos direcionados à reciclagem e reutilização dos mesmos, justificando assim a realização de um estudo nesta área, mais especificamente envolvendo soluções aquosas de LI.

Dados das propriedades termofísicas de líquidos iônicos são necessários para diversas aplicações e para o desenho de plantas químicas (RIBEIRO, 2011). Apesar de sua importância e interesse, valores precisos para muitas das propriedades físico-químicas fundamentais destes compostos são escassos ou

inexistentes. A fim de conceber qualquer processo que envolva líquidos iônicos em escala industrial, é necessário conhecer várias propriedades físicas, incluindo a viscosidade, densidade e equilíbrios líquido-vapor em misturas (ALVAREZ; MATEDDI; AZNAR, 2013).

A escolha dos quatro líquidos iônicos objeto desta pesquisa originou-se da necessidade de recuperação dos líquidos iônicos utilizados nas pesquisas já realizadas na Universidade Estadual de Maringá (UEM) (RIBEIRO, F.R.G et al, 2013).

Um grupo de pesquisa da UEM tem trabalhado com líquidos iônicos para substituição da água no processo de tingimento na indústria têxtil. A última etapa do processo de tingimento envolve a lavagem das peças, gerando um efluente aquoso contaminado com líquido iônico.

## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

### 2.1 LÍQUIDOS IÔNICOS

Líquidos iônicos (LIs) são sais que apresentam-se no estado líquido a temperatura ambiente (RENNER, 2001, IGLESIAS et al, 2008, PINKERT et al, 2011). Composto inteiramente de íons, LIs são diferentes dos solventes moleculares, da água e dos solventes orgânicos, e quimicamente análogos à sais fundidos (YANG; DIONYSIOU, 2004). Normalmente formados por um cátion orgânico e um íon inorgânico, que podem ser customizados, como solventes orgânicos, para dissolver uma ampla faixa de moléculas semelhantes (RENNER, 2001).

LIs podem ser divididos em duas grandes categorias – líquidos iônicos apróticos (LIAs) e líquidos iônicos próticos (LIPs). Até o momento, LIAs têm recebido muito mais atenção do que LIPs. No entanto, nos últimos anos tem havido crescente interesse em LIPs, e nas suas diversas aplicações potenciais para os processos de separação (VEREVKIN et al, 2011).

LIPs são formados através da transferência de um próton a partir de um ácido de Brønsted com uma base de Brønsted, isto conduz a características distintivas entre LIPs e LIAs. LIPs têm um próton disponível para ligações de hidrogênio e o ponto de ebulição geralmente não negligenciável ocorre a uma temperatura mais baixa do que a decomposição (VEREVKIN et al, 2011). São sintetizados facilmente através da combinação de um ácido de Brønsted e de uma base de Brønsted (GREAVES; DRUMMOND, 2008), em proporções estequiométricas, o que possibilita ser produzido para finalidades específicas, tendo como característica principal no estado líquido em temperatura ambiente (RIBEIRO et al, 2013).

Sua natureza líquida é devida a fraca interação entre os íons volumosos envolvidos. Esse caráter iônico permite que se comportem, potencialmente, de uma maneira bem diferente como solventes, em comparação com os solventes convencionais (ANDRADE, 2009).

Os líquidos iônicos (LI) demonstram ser o solvente alternativo mais explorado nos últimos anos (VASCONCELOS; PIZZUTI, 2012). Designados como solventes

“verdes” por apresentarem pressão de vapor extremamente baixa, pouca ou nenhuma inflamabilidade, estabilidade térmica e química, alta condutividade iônica, capacidade de atuar como catalisadores, dissolver uma vasta variedade de compostos orgânicos e inorgânicos, e de serem reciclados e reutilizados (SEOUD et al., 2007, RIBEIRO, 2011, ANASTAS; EGHBALI, 2010).

Resumindo, os líquidos iônicos são estáveis, solúveis e possuem baixa pressão de vapor (GOVINDA et al., 2013). A Tabela 1 apresenta as principais vantagens e desvantagens dos líquidos iônicos.

TABELA 1 - PRINCIPAIS VANTAGENS E DESVANTAGENS DOS LÍQUIDOS IÔNICOS

VANTAGENS	DESVANTAGENS
Propriedades físicas e químicas moduláveis	Alta viscosidade
Baixa ou nenhuma inflamabilidade	Alto custo
Baixa pressão de vapor	Extração de produtos de reação com solventes orgânicos
Alta condutividade iônica	Poucos dados de toxicidade
Ampla janela de potencial eletroquímico	Reatividade em meio básico
Ação catalisadora	
Reciclagem e reutilização	

FONTE: ANDRADE (2009)

Como mencionado acima, os líquidos iônicos não tem pressão de vapor detectável, e não há portanto contribuição de VOC (composto orgânico volátil) para a atmosfera. Mas esta não é a única razão para a utilização de líquidos iônicos. Outra razão é que, pelo menos um milhão de líquidos iônicos são potencialmente possíveis de serem sintetizados (ROGERS; SEDDON, 2003). A Tabela 2 apresenta um comparativo entre os solventes orgânicos e líquidos iônicos.

TABELA 2 - COMPARATIVO ENTRE SOLVENTES ORGÂNICOS E LÍQUIDOS IÔNICOS

PROPRIEDADE	SOLVENTES ORGÂNICOS	LÍQUIDOS IÔNICOS
Número de solventes	>1000	>1000000
Aplicabilidade	Única	Multifuncional
Habilidade catalítica	Rara	Comum e modelável
Quiralidade	Rara	Comum e modelável
Pressão de vapor	Obedece a equação de Clausius-Clapeyron	Negligenciável sob condições normais
Inflamabilidade	Geralmente inflamável	Geralmente não inflamável
Viscosidade (cP)	0.2 - 100	22 – 40000
Densidade (g/cm <sup>3</sup> )	0.6 – 1.7	0.8 – 3.3

FONTE: ADAPTADO DE PLECHKOVA;SEDDON (2008)

Um obstáculo importante à utilização de LIs é a ausência de compreensão de como a estrutura do LI afeta as suas propriedades físicas e propriedades de resistência do solvente (AKI; BRENNECKE, 2001).

Os LIs provaram ser alternativas seguras e sustentáveis para muitas aplicações na indústria e na fabricação de produtos químicos. Seu sucesso decorre principalmente de suas propriedades termofísicas, e a versatilidade da sua síntese, gerenciável para ser adaptado para uma determinada aplicação (RIBEIRO, 2011).

As propriedades físico-químicas dos LIs, como todos os outros materiais, dependem de forças intermoleculares e intramoleculares e, por conseguinte, da estrutura do cátion e do anion (GREAVES; DRUMMOND, 2008).

Todas as propriedades físico-químicas, tais como viscosidade, densidade, condutividade, ou ponto de fusão, são sintonizáveis, portanto ajustáveis, por meio de uma escolha judiciosa de seus componentes catiônicos e aniônicos (BILLARD et al., 2011).

Além disso, o grupo R do cátion é variável e pode ser utilizado para afinar as propriedades do líquido iônico (HUDDLESTON et al., 1998). A Figura 1 apresenta alguns grupos R de cátions e ânions.

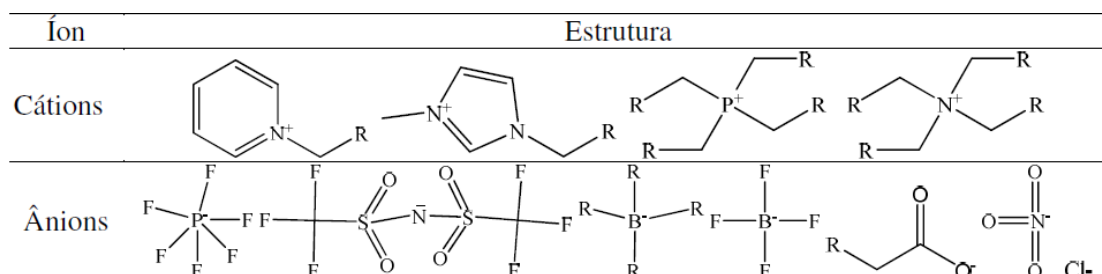


FIGURA 1 - PRINCIPAIS CÁTIONS E ÂNIONS UTILIZADOS  
FONTE: ANDRADE (2009)

Pela simples troca do ânion ou da cadeia lateral do cátion podem-se variar as propriedades físicas de LI, tais como hidrofobicidade, viscosidade, densidade e solvatação do sistema LI (ANDRADE, 2009).

Além disso, no final da reação, o líquido iônico pode ser reciclado após etapas de separação e purificação (ALVAREZ; MATEDDI; AZNAR, 2013).

A quantidade de água presente nas amostras tem um efeito significativo sobre as suas propriedades físico-químicas

(GREAVES;DRUMMOND,2008). Sendo a água portanto uma impureza problemática nos LIs.

### 2.1.1 Síntese dos líquidos iônicos

A síntese dos LIPs pode seguir duas rotas diferentes, a primeira consiste na neutralização de uma solução aquosa de amina que começa com um ácido conveniente, a segunda é executada sob condições livres de solvente, pela mistura dos reagentes e aquecimento da mistura dos componentes até o ponto de fusão em atmosfera argônio (STRACKE, 2008).

Os LIs utilizados neste trabalho foram sintetizados pela UEM através de uma reação de neutralização simples, ácido-base, conforme informações contidas nos trabalhos de Croscato (2013), Moraes (2013), RIBEIRO, F.R.G et al, 2013). A Figura 2 apresenta as estruturas do cátion e dos ânions utilizados neste trabalho.

## BASE CATIÔNICA - Dietanolamina



## BASE ANIÔNICA



Acético



Propanóico



Butanóico



Pentanóico

FIGURA 2 - ESTRUTURA DO CÂTION E ÂNIONS UTILIZADOS NESTE TRABALHO  
FONTE: RIBEIRO, F.R.G et AL (2013)

## 2.2 VISCOSIDADE

A viscosidade ( $\mu$ ) pode ser utilizada para classificar o comportamento de diversas substâncias. A viscosidade dos fluidos newtonianos é influenciada somente pela temperatura do fluido e pela sua composição, ou seja, são fluidos cuja relação entre a tensão de cisalhamento ( $\sigma$ ) e o gradiente de velocidade é constante e consequentemente, são independentes do tempo. Fluidos que não possuem comportamento newtoniano são chamados de não newtonianos. Nestes, a viscosidade é influenciada pela taxa de deformação ( $\dot{\gamma}$ ), o que significa que a relação entre a taxa de deformação e a tensão de cisalhamento deixa de ser linear (GABAS; MENEZES; TELIS-ROMERO, 2012). A Figura 3 apresenta o comportamento reológico dos fluidos independentes do tempo.

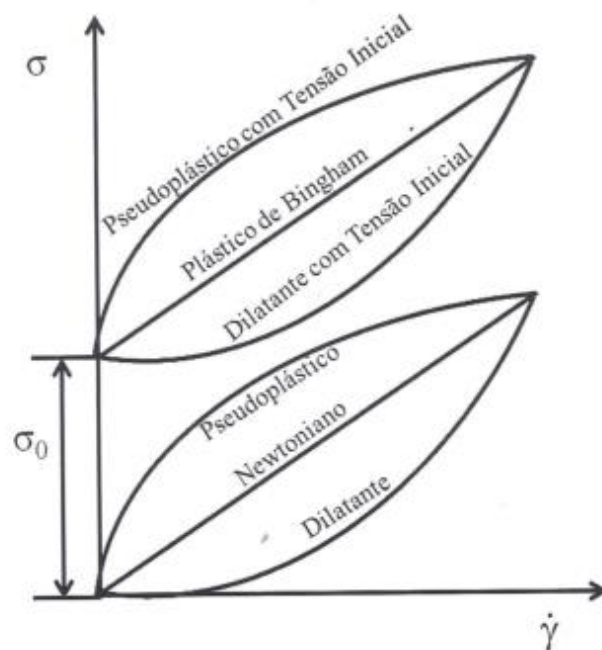


FIGURA 3 - COMPORTAMENTO REOLÓGICO DOS FLUIDOS INDEPENDENTES DO TEMPO  
 FONTE: GABAS; MENEZES; TELIS-ROMERO (2012)

Bird et al. (1960) definiram que as propriedades reológicas dos fluidos podem ser definidas por uma equação do tipo;

$$\sigma = f(\dot{\gamma}) \quad (1)$$



A Tabela 3 ilustra alguns modelos de comportamento reológico:

TABELA 3 - MODELOS REOLÓGICOS PARA DESCREVER O COMPORTAMENTO DE FLUIDOS INDEPENDENTES DO TEMPO

MODELO	EQUAÇÃO(*)
Newton	$\sigma = \mu \cdot \gamma$ (2)
Casson	$\sigma^{0.5} = \sigma_o^{0.5} + k(\gamma)^{0.5}$ (3)
Lei da Potencia	$\sigma = k \cdot \gamma^n$ (4)
Bingham	$\sigma = \sigma_o + \mu_{pl} \cdot \gamma$ (5)
Herschel-Bulkley	$\sigma = \sigma_o + k \cdot \gamma^n$ (6)
Ellis	$\gamma = k_1 \sigma + k_2 \sigma^n$ (7)
Carreau	$\mu = \mu_\infty + (\mu_0 - \mu_\infty)[1 + (k\gamma)^2]^{(n-1)/2}$ (8)
Cross	$\mu = \mu_\infty + \frac{\mu_0 - \mu_\infty}{1 + (k\gamma)^n}$ (9)
Sisko	$\sigma = \mu_\infty + k \cdot \gamma^n$ (10)

\*  $k$ ,  $k_1$  e  $k_2$  são constantes arbitrárias.

FONTE: ADAPTADA DE GABAS;MENEZES;TELIS-ROMERO (2012)

Praticamente todos os LIs conhecidos são relativamente viscosos, apenas alguns deles exibem uma viscosidade ( $\mu$ ) abaixo de 20 cP a 25 ° C (BILLARD et al., 2011), e outros podem chegar a 10<sup>5</sup> cP (ANDRADE, 2009).

A viscosidade sofre efeito da temperatura, sendo que seu valor diminui com o aumento da temperatura (PINKERT et al,2011, GOVINDA et al., 2013, BILLARD et al., 2011), conforme pode ser visualizado na Figura 4.

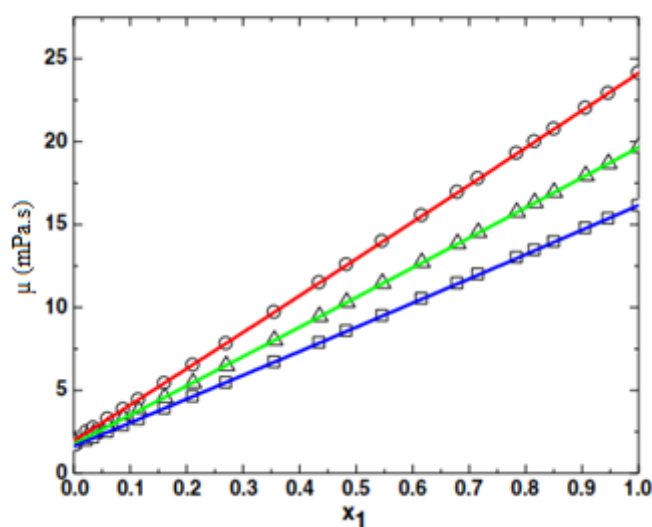


FIGURA 4 - VISCOSIDADES PARA MISTURAS DE LÍQUIDOS IÔNICOS ( $x_1$ ) PARA: TEAA A 298.15 K (O), TEAA A 303.15 K ( $\Delta$ ) E TEAA A 308.15 K ( $\square$ )

FONTE: GOVINDA et al (2011)

A viscosidade é dependente das interações íon-íon, tais como interações de van der Waals e ligações de hidrogênio, com maiores interações conduzindo a viscosidades mais elevadas (GREAVES;DRUMMOND,2008).

Em geral a viscosidade aumenta com o número de grupos hidroxis presentes no produto, estes grupos apresentam influência significativa nas propriedades termofísicas (PINKERT; MARSH; PANG, 2011), conforme ilustra a Figura 5.

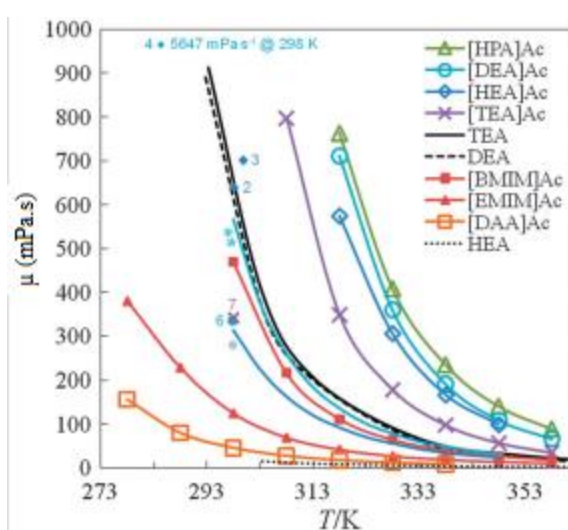


FIGURA 5 - VISCOSIDADE EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA PARA VÁRIOS GRUPOS DE LÍQUIDOS IÔNICOS

FONTE: PINKERT et al (2011).

As propriedades físicas dos LIs são bastante investigadas e alguns casos devem ser analisados, como o estudo de Widegren et al.(2005) que faz uma análise do comportamento da viscosidade do LI em variação à adição de água, como o caso do [C2mim] [Tf2N], em que sua viscosidade diminuiu cerca de 30% com a adição de apenas 1% (massa) de água.

A estrutura do cátion influencia a viscosidade (WASSERSCHIED; KEIM, 2000). Alvarez et al. (2010) relatam a tendência decrescente da viscosidade com o aumento da temperatura e diminuição do peso molar para os LIPs. E de acordo com Croscato (2013), o aumento do teor de água presente no LIP ocasiona o decréscimo da viscosidade.

Os resultados obtidos por Croscato (2013) na Tabela 4 mostram pouca variação da viscosidade em relação ao aumento da cadeia alquila dos LIPs m-2HEAPr, m-2HEAB e m-2HEAPe, com exceção do LI m-2HEAA que apresentou um resultado inconsistente para o teste realizado.

TABELA 4 - DADOS EXPERIMENTAIS EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA PARA CADA SÍNTESE DE LÍQUIDOS IÔNICOS. VALORES EM  $\mu$  /mPa.s

LIS	VISCOSIDADE			
	20 °C	30 °C	50 °C	70 °C
m-2HEAA	865,6	393,4	108,6	42,1
m-2HEAPr	441,3	207,3	68,7	29,4
m-2HEAB	403,0	220,8	77,0	31,0
m-2HEAPe	428,0	228,0	74,0	30,8

FONTE: CROSCATO (2013)

Moraes (2013) também obteve pouca variação da viscosidade em relação ao aumento da cadeia alquila, conforme observado na Tabela 5.

TABELA 5 - RESULTADO DE VISCOSIDADE DOS LIPS. VALORES EM  $\mu$  /mPa.s

LIS	VISCOSIDADE		
	50 °C	60 °C	70 °C
2HTEAA	316	137	82
2HTEAPr	248	100	61
2HTEAB	234	125	75
2HTEAPe	201	111	68

FONTE: MORAES (2013)

Comparando os trabalhos de Croscato (2013) que utiliza a metil monoetanolamina como base catiônica e Moraes (2013) que utiliza 2-hidroxi trietilamônio como base catiônica, observa-se que a alteração nestas bases representa variações significativas nos valores obtidos para a viscosidade.

Em geral para a maioria dos LIs, a viscosidade aumenta com o aumento da massa molecular. No entanto, esta regra não é válida para todos os LIs, já que IGLESIAS et al.(2010) relata em seu trabalho uma redução da viscosidade quando ocorre um aumento na massa molecular, conforme ilustra a Figura 6.

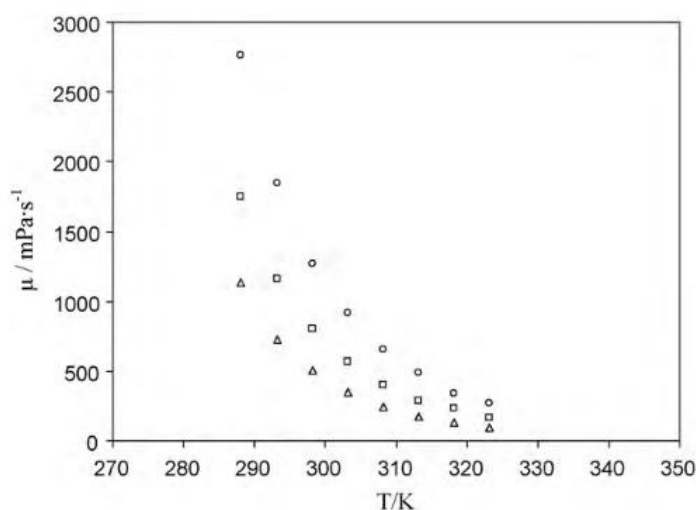


FIGURA 6 - CURVAS DE VISCOSIDADES EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA (278.15-338.15 K): (O) 2-HIDROXIETILAMONIO PENTANOATO (2-HEAPE), (□) 2-HIDROXIDIETILAMONIO PENTANOATO (2-HDEAPE) E (Δ)2-HIDROXITRIETILAMONIO PENTANOATO (2-HTEAPE)  
 FONTE: IGLESIAS et al.(2010)

Os LIPs utilizados neste trabalho apresentam a viscosidade classificada como fluido newtoniano (RIBEIRO, F.R.G. et al.,2013).

A equação

$$\mu = A \cdot X^B \cdot \exp\left(\frac{C}{T}\right) \quad (11)$$

Onde:

$\mu$  é a viscosidade, em cP

A, B e C são parâmetros ajustáveis

$C = \frac{E_a}{R}$  :  $E_a$  é a energia de ativação e R é a constante universal dos gases

X é a fração mássica

T é a temperatura, em K

permite observar o efeito das duas variáveis (concentração e temperatura) na viscosidade. O aumento da concentração causa um aumento nos parâmetros reológicos, enquanto o aumento da temperatura causa efeito contrário, ou seja, a diminuição dos valores desses parâmetros (GABAS; MENEZES; TELIS-ROMERO, 2012).

## 2.3 DENSIDADE

A densidade mede o grau de concentração de massa em determinado volume. Quando se aumenta a temperatura de um determinado fragmento de matéria, tem-se um aumento do volume fixo desta, pois haverá a dilatação ocasionada pela separação dos átomos e moléculas. Ao contrário, ao se diminuir a temperatura, tem-se uma diminuição deste volume fixo (MORAES,2013).

A densidade de um material depende de quão estreita os íons podem embalar o conjunto e, por conseguinte, sobre o tamanho e a forma dos íons e as interações íon-íon (GREAVES;DRUMMOND,2008).

A densidade diminui com o aumento da temperatura (PINKERT et al,2011). A Figura 7 ilustra este comportamento.

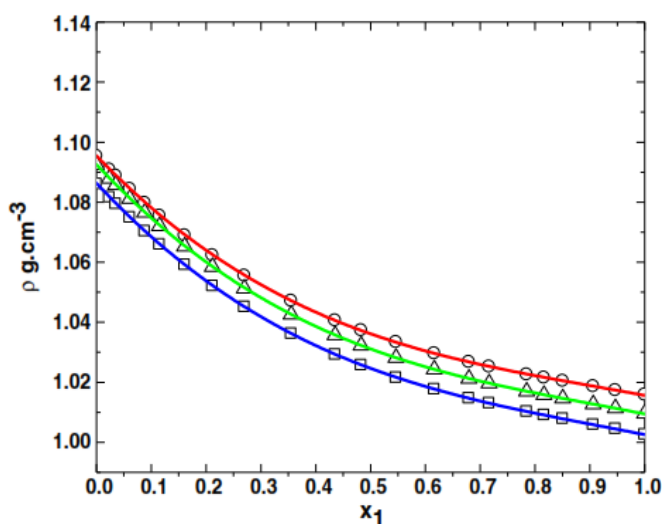


FIGURA 7 - DENSIDADES PARA MISTURAS DE LÍQUIDOS IÔNICOS PARA: TEAA A 298,15 K (O), TEAA A 303,15 K (Δ) E TEAA A 308,15 K (□)  
FONTE: GOVINDA et AL (2011)

Dois fatores regulam a densidade nos líquidos iônicos: (i) o tamanho do íon e (ii) a presença de grupos hidroxila em ambos os cátions e ânions. Íons maiores resultam em LIs menos densos, enquanto que um número crescente de grupos hidroxila em ambos os íons resulta em aumento da densidade (PINKERT et al,2011). A Figura 8 apresenta o comportamento da densidade em função da temperatura para vários grupos de líquidos iônicos.

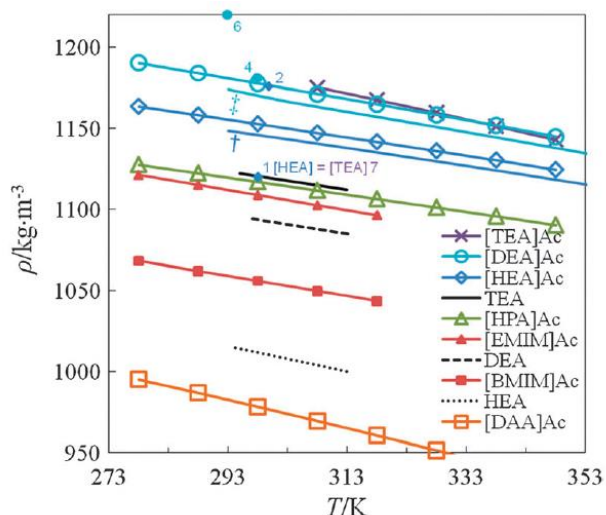


FIGURA 8 - DENSIDADE EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA PARA VÁRIOS GRUPOS DE LÍQUIDOS IÔNICOS  
 FONTE: PINKERT et al (2011).

A densidade é influenciada pelo tipo de cátion e anion do liquido ionico. De modo geral, pode-se concluir que a densidade dos líquidos iônicos decresce com o aumento da cadeia aniônica. Desta forma, a densidade pode ser ajustada através de pequenas alterações estruturais no anion. (WASSERSCHIED; KEIM, 2000).

Segundo Alvarez (2010) a adição de carbonos no anion diminui a densidade do LI, e a adição de grupos hidroxila ou amônio no cátion para um tipo de anion aumenta a densidade do LI, como observado na Figura 9.

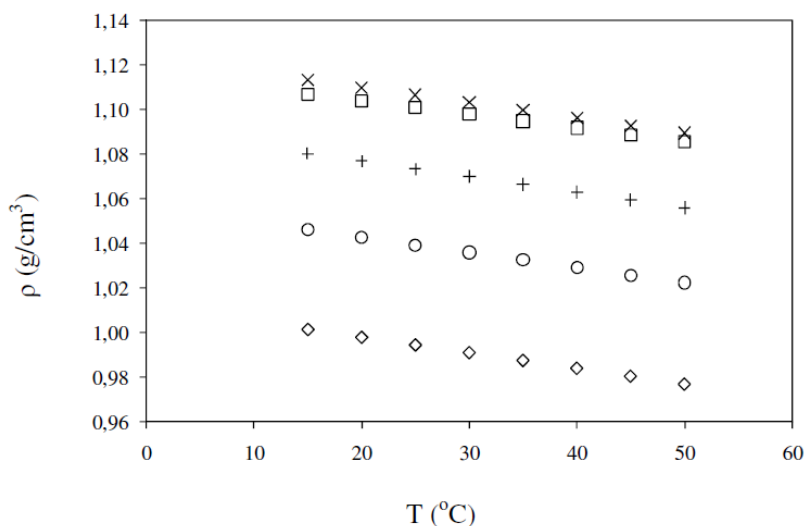


FIGURA 9 - DENSIDADE EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA A PRESSÃO AMBIENTE PARA LÍQUIDOS IÔNICOS PUROS: M-2-HEAA (□), M-2-HEAB (○), M-2-HEAH (◇), M-2HE2AB (X) E N-(2-HE)EDAB (+)  
 FONTE: ALVAREZ (2010)

Croscato (2013) também concluiu que os resultados da densidade diminuem à medida que o grupo alquila aumenta o comprimento da sua cadeia, ou seja, quanto menor o anion maior a densidade, sendo o LIP m-2HEAA com maior densidade seguido sequencialmente pelos LIPs m-2HEAPr, m-2HEAB e m-2HEAPe. A Tabela 6 apresenta os resultados obtidos por Croscato.

TABELA 6 - DADOS EXPERIMENTAIS DE DENSIDADE EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA PARA CADA SÍNTESE DE LÍQUIDOS IÔNICOS. VALORES EM g/cm<sup>3</sup>

T °C	m-2HEAA	m-2HEAPr	m-2HEAB	m-2HEAPe
	$\rho$	$\rho$	$\rho$	$\rho$
20	1.105	1.074	1.042	1.019
30	1.098	1.066	1.036	1.017
40	1.093	1.060	1.029	1.009
50	1.087	1.055	1.022	1.000

FONTE: ADAPTADO DE CROSCATO (2013)

Na Figura 10, Moraes (2013) observa que os resultados das densidades estão relacionados com os ânions, ou seja, quanto menor o ânion, maior a densidade. O LIP 2HTEAA possui maior densidade, seguido pelo LIP 2HTEAPr, 2HTEAB e o LIP 2HTEAPe.

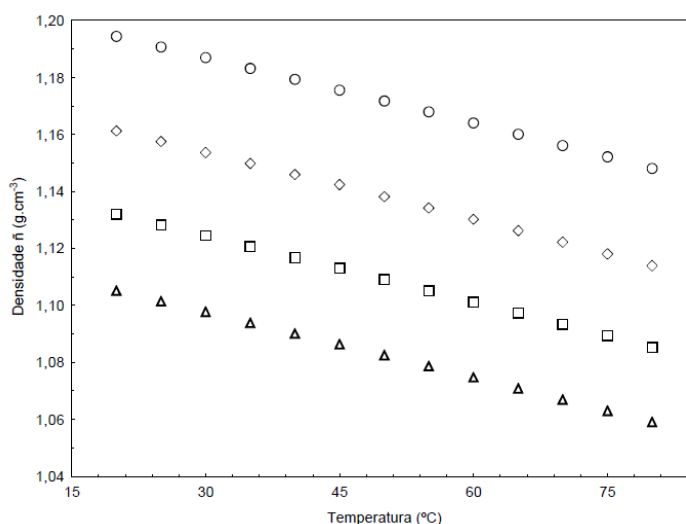


FIGURA 3 - CURVA DE DENSIDADE  $\rho$  (g/cm<sup>3</sup>) DOS LIPS NAS TEMPERATURAS DE 20 °C A 80 °C: (O) 2-HIDROXI TRIETANOLAMINA ACETATO (2HTEAA), (◇) 2-HIDROXI TRIETANOLAMINA PROPIONATO (2HTEAPR), (□) 2-HIDROXI TRIETANOLAMINA BUTANOATO (2HTEAB) E (Δ) 2-HIDROXI TRIETANOLAMINA PENTANOATO  
FONTE: MORAES (2013)

Através dos trabalhos de Croscato(2013) e Moraes (2013) observa-se que a densidade aumenta com o aumento da massa molecular. IGLESIAS et al.(2010) também relata essa tendência de aumentar a densidade quando ocorre um aumento na massa molecular conforme Figura 11. O mesmo foi observado por COTA et al. (2007), de acordo com a Tabela 7.

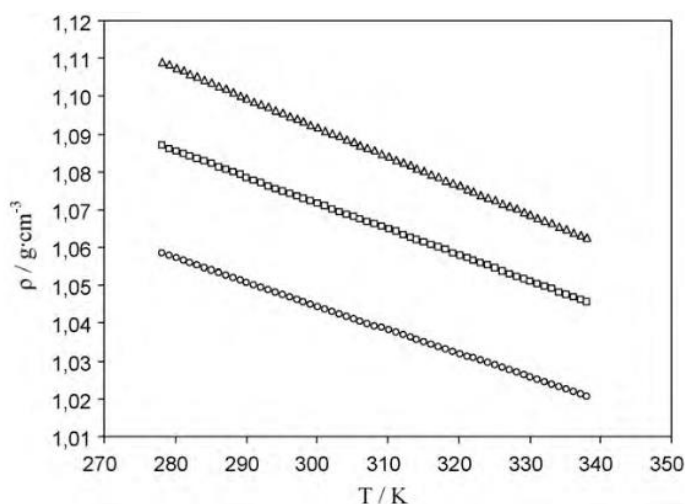


FIGURA 4 - CURVAS DE DENSIDADE EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA (278.15-338.15 K): (O) 2-HIDROXIETILAMONIO PENTANOATO (2-HEAPE), (□) 2-HIDROXIDIETILAMONIO PENTANOATO (2-HDEAPE) E (Δ)2-HIDROXITRIETILAMONIO PENTANOATO (2-HTEAPE)  
 FONTE: IGLESIAS et al.(2010)

TABELA 7 – RESULTADOS EXPERIMENTAIS PARA LÍQUIDOS IÔNICOS PUROS A 298.15 K

	MASSA MOLECULAR (g/mol)	DENSIDADE (g/cm <sup>3</sup> )
2-HEAF	107.11	1.176489
2-HDEAF	157.17	1.194041
2-HTEAF	195.22	1.221864

FONTE: COTA ET AL (2007)

Hou (2013) obteve valores experimentais da densidade ( $\rho$ ) para soluções aquosas de LIPs em base amônia (N2Ac + água e N3Ac + água). Na Figura 12, verifica-se que os valores da densidade aumentam em primeiro lugar e, em seguida, diminuem quando a fração molar  $x_1$  aumenta, atingindo um valor máximo aos  $x_1 \approx 0.1$  e  $x_1 \approx 0.2$  para o último sistema. A diminuição pode ser devida a uma diminuição nas interações dos pares iônicos.



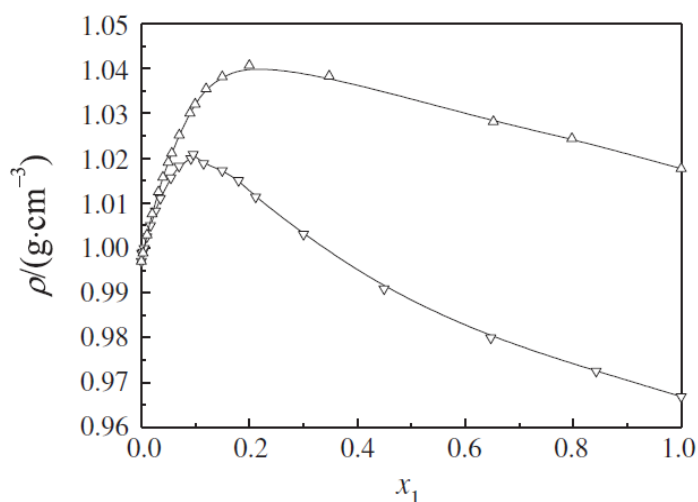


FIGURA 5 - COMPARAÇÃO DE DENSIDADES DE MISTURA BINÁRIAS DE LÍQUIDO IÔNICO(1) + ÁGUA(2): (▽) N2AC E (Δ)N3AC  
 FONTE: HOU (2013)

## 2.4 ELEVAÇÃO DO PONTO DE EBULIÇÃO

Quando um soluto não volátil é dissolvido em água, observa-se que a temperatura de ebulição da solução é superior ao valor da temperatura de ebulição da água pura. Este fenômeno é denominado elevação do ponto de ebulição.

As propriedades coligativas dependem exclusivamente do número de partículas do soluto em solução, não estando relacionadas com a natureza química do soluto, desde que o soluto seja não volátil (AICHINGER; BACH; MOREIRA, 1980). A Lei de Raoult estabelece que em soluções ideais, a pressão parcial de um componente numa solução é dada pelo produto de sua fração molar e sua pressão de vapor na temperatura da solução. Assim, quanto maior for a concentração de um determinado soluto dissolvido em água, menor será a fração molar da água na solução e, conseqüentemente, menor será o valor da pressão parcial da água.

Admitindo que o soluto seja não-volátil, a solução entrará em ebulição quando a pressão parcial da água se igualar com a pressão do sistema. Para que isto ocorra, é necessário que a solução seja aquecida até uma temperatura superior à temperatura de ebulição da água pura (WESTPHALEN, 2000).

Faggion (2013) relata em seu trabalho que a presença do sal (NaCl) aumentou a temperatura de ebulição da água, e que o aumento no ponto de ebulição é dependente da concentração de sal na solução. Isso indica que o NaCl fortaleceu as ligações intermoleculares da água, requerendo uma maior energia para atingir a volatilização do sistema. O efeito da adição de sal no ponto de ebulição da mistura se manteve em todas as pressões utilizadas. A Figura 13 ilustra o efeito da presença de NaCl na pressão de saturação da água.

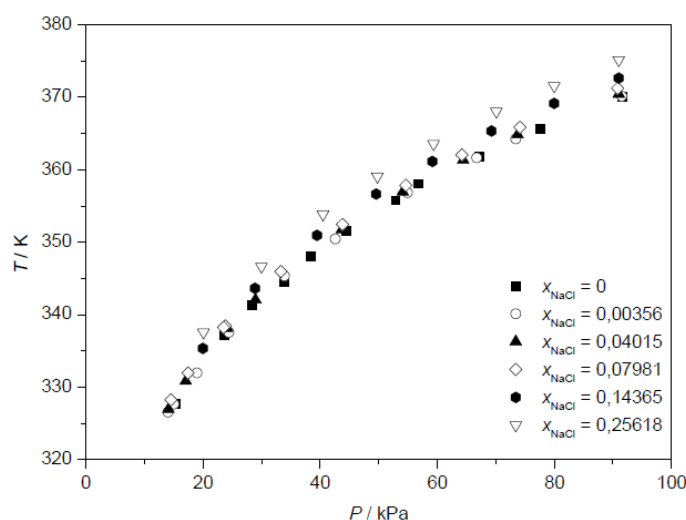


FIGURA 13 - EFEITO DA PRESENÇA DE NaCl NA PRESSÃO DE SATURAÇÃO DA ÁGUA AVALIADA ENTRE AS PRESSÕES DE 14 A 92 KPa.  
FONTE: FAGGION (2013)

Os resultados experimentais para o ponto de ebulição da solução normalmente são plotados em função do ponto de ebulição do solvente puro à mesma pressão. As linhas de composição constantes em tais diagramas são conhecidas como linhas de “Dühring”. Assim, o diagrama de “Dühring” é uma forma ideal de interpolação entre resultados experimentais (BLACKADDER; NEDDERMAN, 2004). Diferentes linhas são obtidas para diferentes concentrações (MCCABE; SMITH; HARRIOTT, 2005), conforme ilustra a Figura 14.

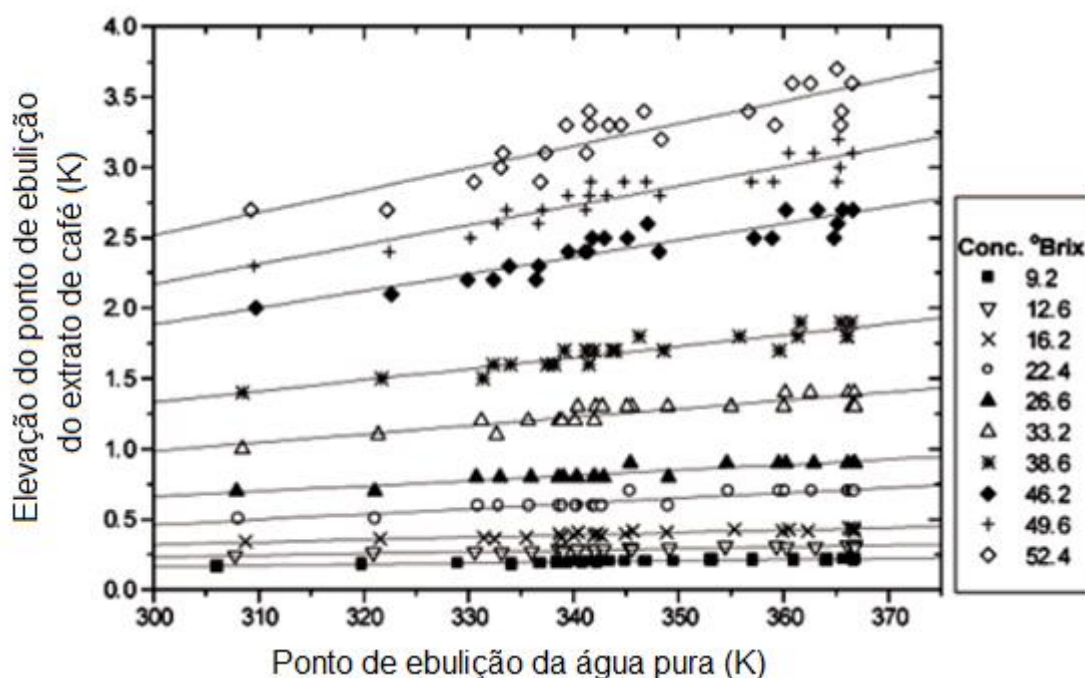


FIGURA 6 - ELEVAÇÃO DO PONTO DE EBULIÇÃO DE EXTRATOS DE CAFÉ EM DIFERENTES FRAÇÕES MÁSSICAS DE SÓLIDOS  
FONTE: J.TELIS-ROMERO et al. (2002)

Atualmente, a separação de compostos em misturas líquidas com LIs têm recebido muita atenção, por se tratar de um processo novo e com grande potencial para ser reutilizado sem perdas ao ambiente, caracterizando processos ecologicamente limpos (ALVAREZ, 2010).

O método mais comum usado para a correlação de equilíbrio de fases em misturas a alta e baixa pressão, é a utilização de equações de estado (EOS). A EOS mais comum e utilizada industrialmente são as equações cúbicas derivados de Van der Waals; entre estes, a EOS Peng-Robinson (AKI; BRENNECKE, 2001) provou combinar a simplicidade e a precisão necessária para o predição e correlação de propriedades termodinâmicas, embora possa haver problemas ao aplicar a EOS PR em sistemas perto do ponto crítico (ALVAREZ; MATEDDI; AZNAR, 2013).

O principal problema na modelagem do equilíbrio líquido-vapor (ELV) em sistemas que contenham líquidos iônicos é a previsão das concentrações insignificantes de líquido iônico na fase de vapor (ALVAREZ; AZNAR, 2008).

Alvarez et al. (2013) estudou o equilíbrio líquido-vapor de uma mistura binária de LI, onde considerou que o líquido iônico tem pressão de vapor desprezível nas temperaturas investigadas, sendo a fase vapor, essencialmente de acetato de metila

puro, assumindo assim o comportamento de um gás ideal. Portanto, o coeficiente de atividade para o acetato de metila pode ser calculado a partir da relação de equilíbrio simplificado:

$$\gamma_1 = \frac{P}{x_1 \cdot P_1^{sat}} \quad (12)$$

Onde  $P_1^{sat}$  é a pressão de vapor do acetato de metila puro, estimado pela equação de Antoine. A Tabela 8 traz os resultados obtidos por Alvarez.

TABELA 8 - EQUILÍBRIO LÍQUIDO-VAPOR (FRAÇÃO MOLAR) E COEFICIENTE DE ATIVIDADE PARA O SISTEMA BINÁRIO DE ACETATO DE METILA (1) + 2-HE<sub>2</sub>AB(2)

X1	Y1	T(K)	$\gamma_1$
1.0000	1.0000	329.8	1.0102
0.9959	1.0000	330.1	1.0038
0.9918	1.0000	330.2	1.0045
0.9894	1.0000	330.3	1.0034
0.9710	1.0000	330.6	1.0118
0.9652	1.0000	330.8	1.0109

FONTE: ALVAREZ et al. (2013)

### 3 OBJETIVOS

O objetivo geral do trabalho é a determinação experimental da elevação do ponto de ebulição, viscosidade e densidade de soluções de LI derivados da Dietanolamina (DEA) (base catiônica) com os ácidos Acético, Propanóico, Butanóico e Pentanóico (bases aniônicas).

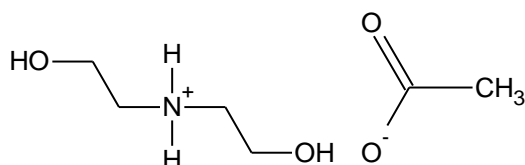
#### 3.1 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Purificar os líquidos iônicos sintetizados pelo método de rotaevaporação;
- Analisar o teor de água dos LI;
- Validar o procedimento de medição da viscosidade e avaliar o comportamento reológico dos LIs;
- Validar o procedimento de medição da densidade e avaliar os resultados obtidos para cada LI;
- Validar o procedimento de medição do ponto de ebulição e avaliar os resultados obtidos para cada LI.

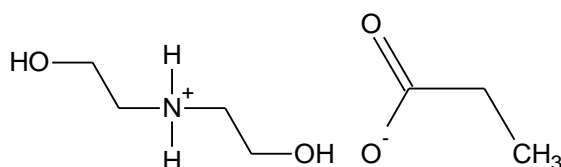
## 4 MATERIAIS E MÉTODOS

Os quatro LI utilizados foram sintetizados e fornecidos pelo laboratório de Engenharia Química da Universidade Estadual de Maringá.

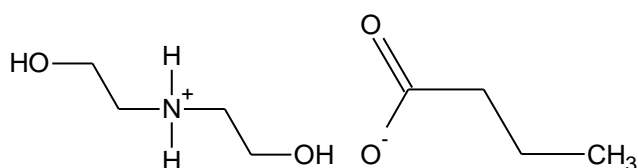
- 2HDEAA – 2-Hidroxi Dietilamonio Acetato



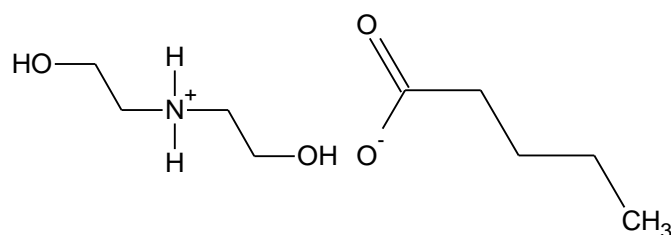
- 2HDEAPr – 2-Hidroxi Dietilamonio Propinoato



- 2HDEAB – 2-Hidroxi Dietilamonio Butanoato



- 2HDEAPe – 2-Hidroxi Dietilamonio Pentanoato



O procedimento de síntese seguiu informações obtidas no trabalho de Mattedi, et al (2011). Inicialmente adiciona-se a base dietanolamina em um balão de vidro de três bocas, o balão é acondicionado em um banho térmico. Em um funil de separação adiciona-se o ácido orgânico (acético, propanóico, butanóico ou pentanóico). Goteja-se o ácido lentamente sobre a base dietanolamina por um período aproximado de 6 horas. Em uma das bocas laterais do balão de vidro é introduzido um agitador mecânico para permitir agitação vigorosa. Na outra boca lateral acopla-se um condensador para permitir o refluxo do solvente. Monitora-se a

temperatura através de termômetro digital. Dependendo do ácido utilizado a reação pode ser exotérmica ou endotérmica, sendo assim necessário o resfriamento ou aquecimento do meio reacional, respectivamente.

A Figura 15 ilustra o aparato instrumental utilizado para a síntese dos LIs.

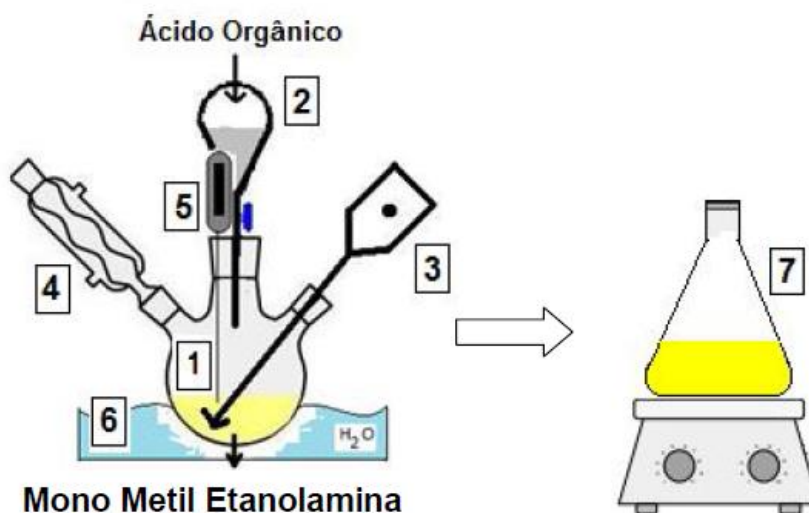


FIGURA 15 - (1) TUBO DE TRÊS BOCAS CONTENDO A BASE DIETANOLAMINA, (2) FUNIL DE SEPARAÇÃO CONTENDO ÁCIDO ORGÂNICO, (3) SISTEMA DE AGITAÇÃO MECÂNICA, (4) REFLUXO, (5) TERMÔMETRO, (6) BANHO TERMOSTATIZADO, (7) AGITAÇÃO MAGNÉTICA.  
FONTE: CROSCATO (2013), MORAES (2013)

O LI obtido na sequência foi rotaevaporado a 50°C durante 48 horas para reduzir o teor de água e vaporizar possíveis solventes não reagidos (CROSCATO,2013).

A pureza do LI foi verificada através de ressonância magnética nuclear (RMN), não sendo evidenciado nenhum pico diferente da estrutura prevista.

Os fabricantes e a pureza dos reagentes utilizados neste trabalho estão listados na Tabela 9:

TABELA 9 - REAGENTES UTILIZADOS NESTE TRABALHO

REAGENTE	PUREZA (%)	FABRICANTE	CAS#
ÁGUA DESTILADA	-	UFPR(*)	-
ETANOL	>99,5	Carlo Erba	64-17-5
GLICEROL	>99,5	Carlo Erba	56-81-5

(\*) Laboratório de Engenharia Química

#### 4.1 PURIFICAÇÃO DOS LIS PELO MÉTODO DE ROTA-EVAPORAÇÃO

Metodologia utilizada para reduzir o teor de água dos Lis, tendo em vista que as propriedades físicas são influenciadas por esse teor e também vaporizar os solventes não reagidos. A amostra é colocada num balão de fundo redondo à vácuo, que fica sob rotação, em contato com um banho de aquecimento, onde a temperatura elevada incentiva a ebulição. A rotação da amostra aumenta a taxa de remoção e diminui possíveis projeções do líquido. O material volátil segue para um frasco coletor.

Os Lis foram aquecidos a temperatura de 323.15 K durante 48 horas.

#### 4.2 TEOR DE ÁGUA

O teor de água foi determinado pelo método de Karl Fischer, no equipamento Volumetric KF Titrator V30.

#### 4.3 VISCOSIDADE

Para avaliação do comportamento reológico dos líquidos iônicos puros e suas soluções aquosas foi utilizado o viscosímetro de cilindros concêntricos, da marca Brookfield, com os spindles LV3 (faixa de viscosidade entre 100 e 4.000 cP) e SC4-18 (faixa de viscosidade entre 1 e 30.000 cP), na faixa de temperatura de 293.15 a 323.15 K. Para escolha do spindle ideal é necessário o torque estar numa faixa entre 10 – 80 % para minimização dos erros.

Esse instrumento caracteriza-se por conter a amostra em um copo cilíndrico (cilindro externo) e ter um segundo cilindro imerso no primeiro (cilindro interno), de diâmetro menor e coaxial, como mostra a Figura 16. Um dos cilindros é forçado a girar com velocidade constante e o torque transmitido para o outro cilindro é medido.



Ele é classificado como do tipo *Couette* quando o cilindro externo sofre rotação e o cilindro interno permanece em repouso, e do tipo *Searle*, quando o cilindro interno sofre rotação e o cilindro externo permanece em repouso (GABAS; MENEZES; TELIS-ROMERO, 2012). O modelo utilizado foi do tipo *Searle*.

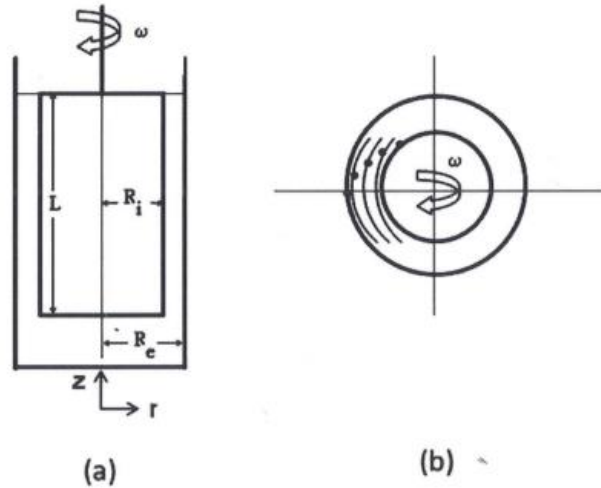


FIGURA 7 - REÔMETRO ROTACIONAL DE CILINDROS CONCÊNTRICOS DO TIPO SEARLE (O CILINDRO INTERNA GIRA E O EXTERNO É FIXO): (A) VISTA LATERAL; (B) VISTA SUPERIOR  
 FONTE: GABAS; MENEZES; TELIS-ROMERO (2012)

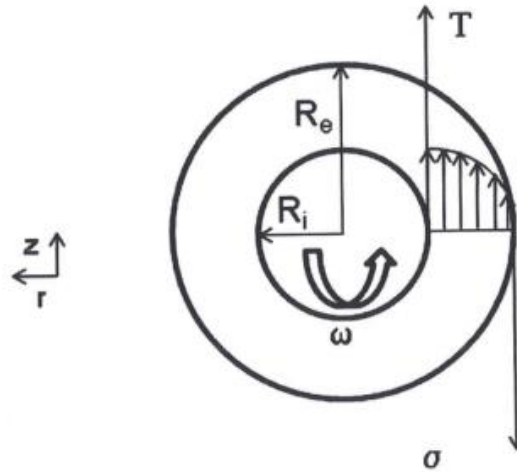


FIGURA 8 - PERFIL DE VELOCIDADES EM UM REÔMETRO DE CILINDROS CONCÊNTRICOS  
 FONTE: GABAS; MENEZES; TELIS-ROMERO (2012)

Considerando o escoamento laminar, regime permanente, efeitos de borda desprezíveis, sistema isotérmico e escorregamento na parede nulo, a tensão de cisalhamento é representada como sendo uma função do torque (GABAS; MENEZES; TELIS-ROMERO, 2012):

$$\sigma = \frac{T}{2\pi r^2 L} \quad (13)$$

E a velocidade angular do cilindro interno, como função da tensão de cisalhamento no espaço anular:

$$\omega = -\frac{1}{2} \int_{\sigma_i}^{\sigma_s} f(\sigma) \frac{d\sigma}{\sigma} \quad (14)$$

Onde a função  $f(\sigma)$  depende do comportamento do fluido.

Sendo a tensão de cisalhamento no cilindro externo igual a:

$$\sigma_s = \frac{T}{2\pi R_s^2 L} \quad (15)$$

E no cilindro interno:

$$\sigma_i = \frac{T}{2\pi R_i^2 L} \quad (16)$$

Foi utilizado a otimização no Matlab, versão 7.0.0.19920, e integração numérica para resolver a equação 14 para os modelos apresentados na Tabela 10.

TABELA 10 - MODELOS SELECIONADOS PARA ESTUDO

MODELO	EQUAÇÃO
Newton	$\omega = -\frac{1}{2} \int_{\sigma_i}^{\sigma_s} \frac{\sigma}{\mu} \frac{d\sigma}{\sigma}$ <p>(17)</p>
Casson	$\omega = -\frac{1}{2} \int_{\sigma_i}^{\sigma_s} \frac{(\sigma^{0,5} - \sigma_0^{0,5})^2}{\mu_{pl}} \frac{d\sigma}{\sigma}$ <p>(18)</p>
Lei da Potência	$\omega = -\frac{1}{2} \int_{\sigma_i}^{\sigma_s} \left(\frac{\sigma}{K}\right)^{\frac{1}{n}} \frac{d\sigma}{\sigma}$ <p>(19)</p>
Bingham	$\omega = -\frac{1}{2} \int_{\sigma_i}^{\sigma_s} \frac{(\sigma - \sigma_0)}{\mu_{pl}} \frac{d\sigma}{\sigma}$ <p>(20)</p>
Herschel-Bulkley	$\omega = -\frac{1}{2} \int_{\sigma_i}^{\sigma_s} \left(\frac{\sigma - \sigma_0}{K}\right)^{\frac{1}{n}} \frac{d\sigma}{\sigma}$ <p>(21)</p>

FONTE: GABAS; MENEZES; TELIS-ROMERO (2012)

Conhecendo os valores dos torques e calculando as velocidades angulares com o auxílio do Matlab, foi possível ajustar as curvas para os modelos escolhidos e analisar estatisticamente o comportamento reológico para diferentes temperaturas.

A construção de diagramas da viscosidade em função da fração mássica de um dos componentes ( $x_2$ ) e da temperatura, para todos os sistemas deste trabalho, apresentou tendência potencial para a fração mássica e exponencial para o parâmetro temperatura. Sendo assim, para todos os sistemas binários água(1) + LI(2), que tiveram as viscosidades medidas em quatro temperaturas diferentes, o melhor ajuste foi obtido através da utilização do modelo apresentado na Equação (11).

Para o ajuste das curvas de viscosidade foi utilizado a função NonLinearFit, do software Maple, versão 15.00.

#### 4.3.1 Validação do método

Inicialmente procedeu-se a validação do método utilizando o viscosímetro digital com glicerol nas temperaturas de 298,15 e 323,15 K. Analisando estatisticamente o comportamento do glicerol frente aos cinco modelos propostos, verifica-se o comportamento newtoniano deste fluido, conforme já definido em literatura.

A Figura 18 apresenta os valores calculados pelo viscosímetro e os valores calculados pelo modelo newtoniano.

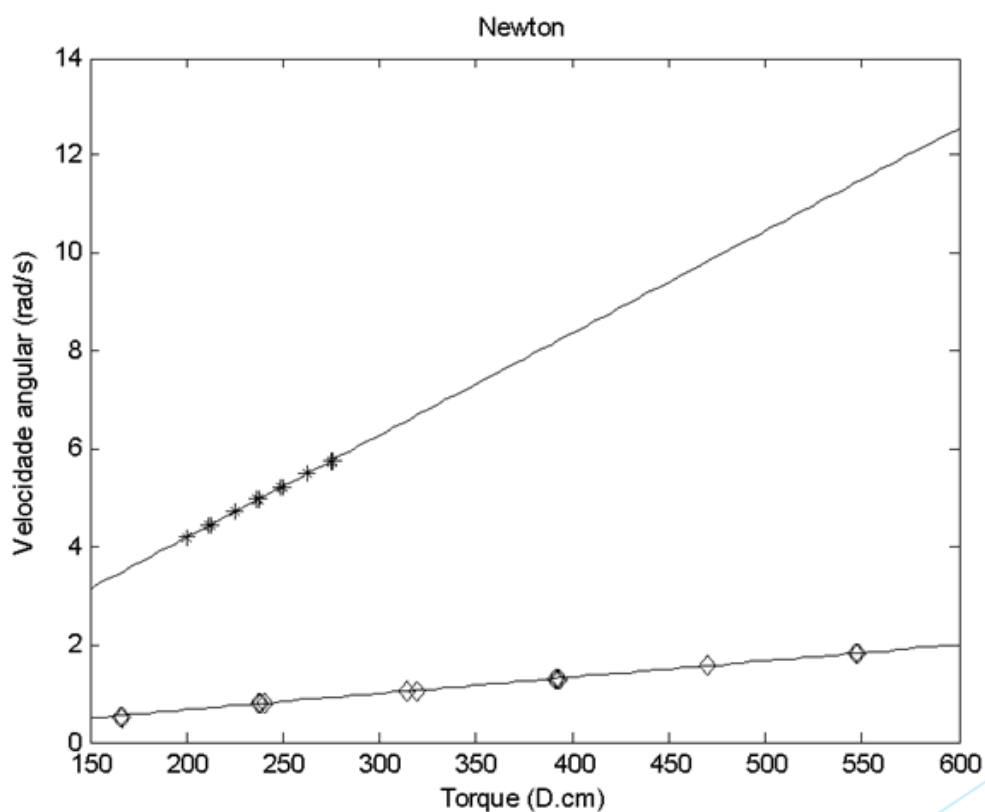


FIGURA 9 - RESULTADOS EXPERIMENTAIS DO VISCOSÍMETRO EM COMPARAÇÃO COM OS RESULTADOS TEÓRICOS (modelo de Newton) CALCULADOS COM O AUXÍLIO DO MATLAB: (x) GLICEROL A 298,15 K, (◇) GLICEROL A 323,15 K E ( - ) modelo.

FONTE: ELABORADO PELO AUTOR

Tanto o procedimento de medição da viscosidade experimental no viscosímetro quanto o cálculo da viscosidade pelo modelo de Newton apresentam resultados válidos para o glicerol conforme Tabela abaixo:

TABELA 11 - VALIDAÇÃO COM GLICEROL

VISCOSIDADE					
GLICEROL A 298.15 K			GLICEROL A 323.15 K		
Literatura	Viscosímetro	Matlab (modelo de Newton)	Literatura	Viscosímetro	Matlab (modelo de Newton)
897,46 cP	900,53 cP	898,20 ± 0,0073 cP	150,87 cP	141,15 cP	138,67 ± 0,0077 cP

#### 4.4 DENSIDADE

As análises de densidade foram realizadas em um densímetro digital AntonPaar DMA 5000M (precisão de  $5 \times 10^{-4} \text{ kg/m}^3$ ), sistema adequado para medidas de densidade de líquidos, na faixa de temperatura de 293,15 a 323,15 K.

A construção de diagramas da densidade em função da fração mássica de um dos componentes ( $x_2$ ) apresentou, para quase todos os sistemas deste trabalho, uma tendência quadrática dos valores experimentais. Sendo assim, para os sistemas binários água(1) + LI(2), que tiveram as densidades medidas em quatro temperaturas diferentes, o melhor ajuste foi obtido através da utilização do modelo apresentado na Equação (23).

Modelos empíricos sugeridos para estudo:

$$\rho = A + B.X_2 + \frac{C}{T} \quad (22)$$

$$\rho = A + B.X_2^2 + C.X_2 + \frac{D}{T} \quad (23)$$

$$\rho = A + B.X_2^2 + C.X_2^3 + D.X_2^2 + E.T \quad (24)$$

$$\rho = A + B.X_2^4 + C.X_2^3 + D.X_2^2 + E.X_2 + F.T \quad (25)$$

Onde:

$\rho$  é a densidade, em  $\text{g/cm}^3$

A, B, C, D, E e F são parâmetros ajustáveis

$X_2$  é a fração mássica do LI

T é a temperatura, em K

Para o ajuste das curvas de viscosidade foi utilizado a função NonLinearFit, do software Maple 15.

#### 4.4.1 Validação do método

Procedeu-se a validação do método no densímetro com a água pura na faixa de temperatura de 293,15 a 308,15 K; e com diferentes concentrações de glicerol + etanol na temperatura de 303,15 K. Sendo ambos os resultados obtidos coerentes com os dados de literatura, de acordo com as Figuras 19 e 20.

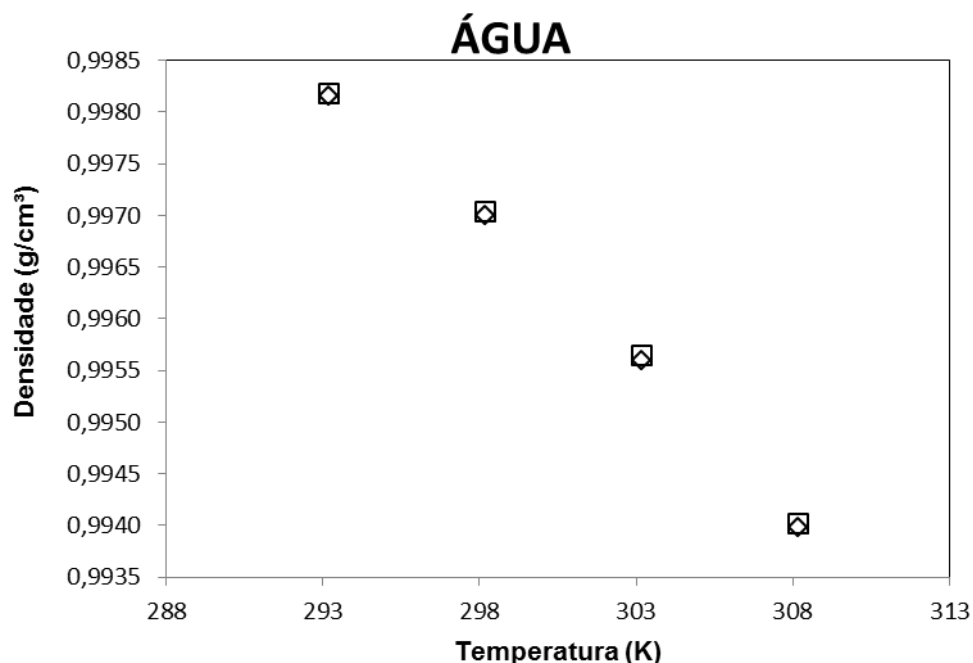


FIGURA 10 - RESULTADOS DA DENSIDADE EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA PARA A ÁGUA:  
 (□) ESTE TRABALHO, (◇) LEMMON;MCLINDEN;FRIEND (2015)  
 FONTE: ELABORADO PELO AUTOR

Estava previsto analisar as densidades da água até a temperatura de 323,15 K, porém só foi possível realizar os experimentos até 308,15 K, pois acima desta temperatura começou a formar bolhas de ar no interior do densímetro ocasionando erro no equipamento.

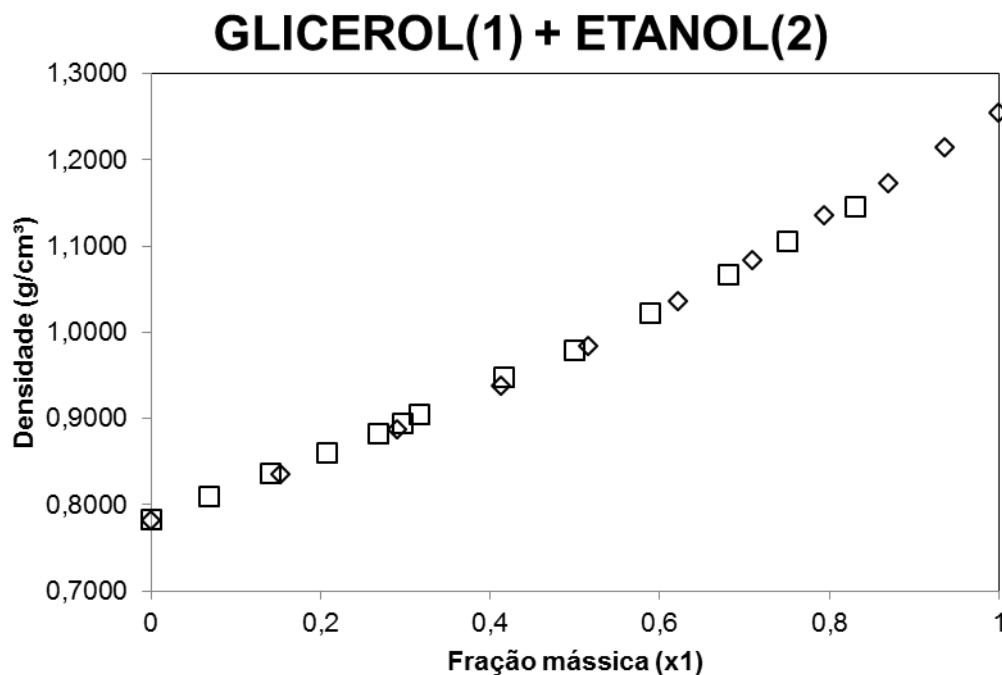


FIGURA 11 - RESULTADOS DA DENSIDADE DA MISTURA BINÁRIA GLICEROL(1) + ETANOL(2) NA TEMPERATURA DE 303,15 K: (□) ESTE TRABALHO, (◇) FAGGION (2013)  
 FONTE: ELABORADO PELO AUTOR

#### 4.5 ELEVAÇÃO DO PONTO DE EBULIÇÃO

##### 4.5.1 Curva de calibração do sensor de temperatura e do transdutor de pressão

A calibração do sensor de temperatura foi realizado por comparação com um termômetro de referência de alta precisão, utilizando um banho termostático para leitura das temperaturas.

$$T = 0.9961 T_t - 0.0697 \quad (26)$$

$T_t$ : temperatura do termistor (°C);

$T$ : temperatura real (do termômetro de referência) (°C).

A calibração do transdutor de pressão foi realizado por comparação com um manômetro de mercúrio de referência.

$$P = 38.0716577 + 1.01011857 P_t \quad (27)$$

$P_t$ : pressão indicada pelo transdutor (mBar);  
 $P$ : pressão real (mBar);.

#### 4.5.2 Validação do procedimento de medição do ponto de ebulição

O procedimento de medição do ponto de ebulição foi realizado nas seguintes condições:

- a) Água em diferentes pressões - Ensaios experimentais de determinação da temperatura de ebulição da água pura em diferentes pressões foram realizados com o propósito de verificar a validade da curva de calibração do transdutor de pressão, bem como verificar a eficiência do equipamento para determinação da temperatura de ebulição em pressões inferiores à atmosférica. Os resultados obtidos são coerentes com os dados de literatura, de acordo com a Figura 21.

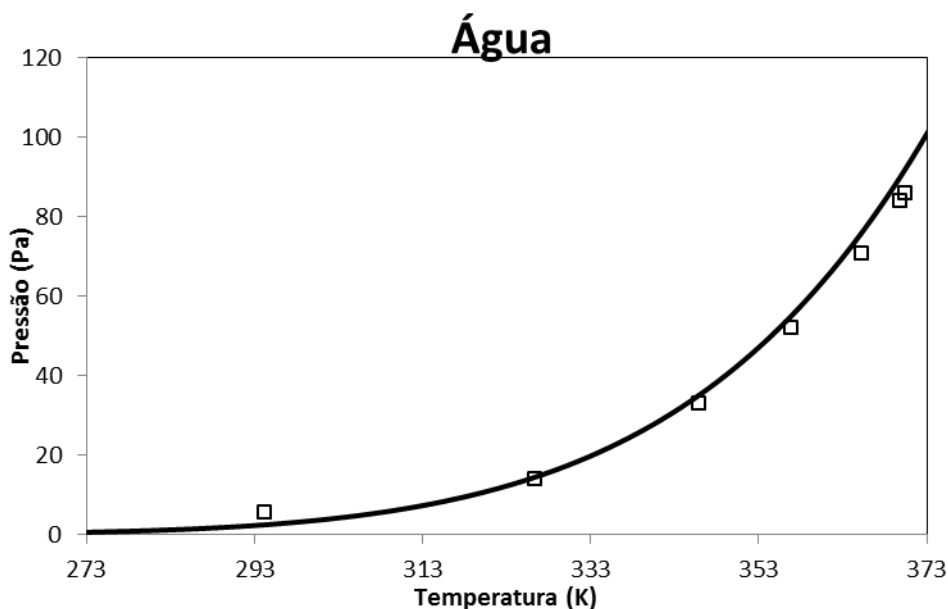


FIGURA 21 - TEMPERATURA DE EBULIÇÃO DA ÁGUA EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA:  
 (□) ESTE TRABALHO, (-) LEMMON;MCLINDEN;FRIEND (2015)  
 FONTE: ELABORADO PELO AUTOR

- b) Solução de etanol e glicerol em diferentes concentrações - Ensaios experimentais com etanol e glicerol à pressão atmosférica local também foram utilizados, com o propósito de validar a metodologia empregada para



diferentes concentrações de soluto. Os resultados obtidos são coerentes com os dados de literatura, de acordo com a Figura 22.

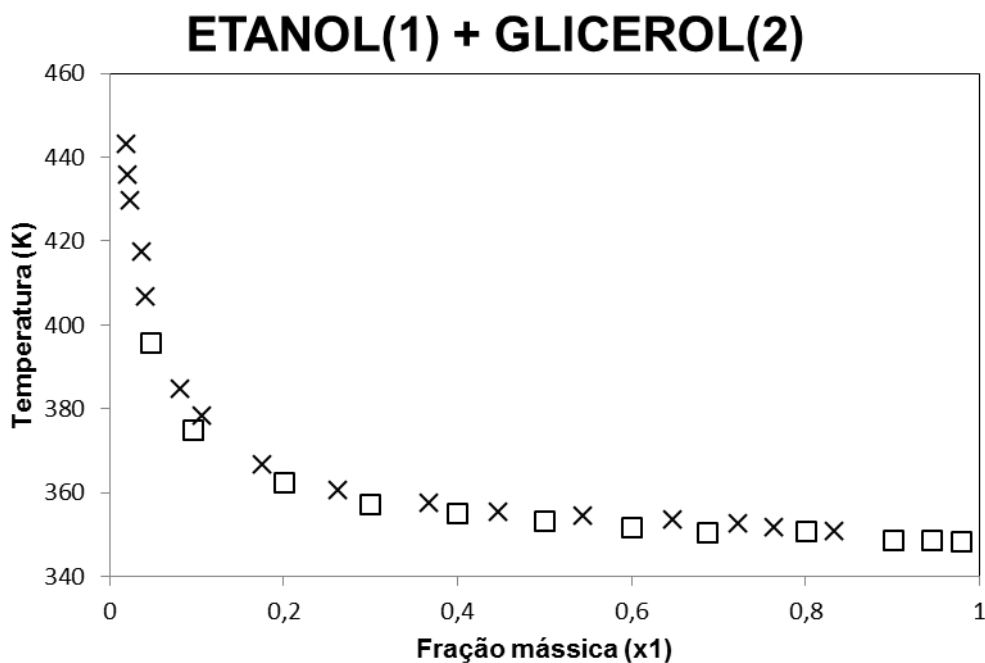


FIGURA 22 - TEMPERATURA DE EBULIÇÃO DO SISTEMA BINÁRIO ETANOL(1) + GLICEROL(2) À PRESSÃO ATMOSFÉRICA: (□) ESTE TRABALHO, (X) FAGGION (2013)  
 FONTE: ELABORADO PELO AUTOR

#### 4.5.3 Medição dos pontos de ebulição

Os ensaios de determinação da elevação do ponto de ebulição foram realizados nas pressões de 30 - 1000 mBar, e em frações mássicas de LI no intervalo de 0,4 a 0,95.

Para a fração mássica de LI de 0,4 os pontos de ebulição obtidos foram bem próximos dos pontos de ebulição para a água pura, por esta razão não foram realizados experimentos abaixo desta fração mássica.

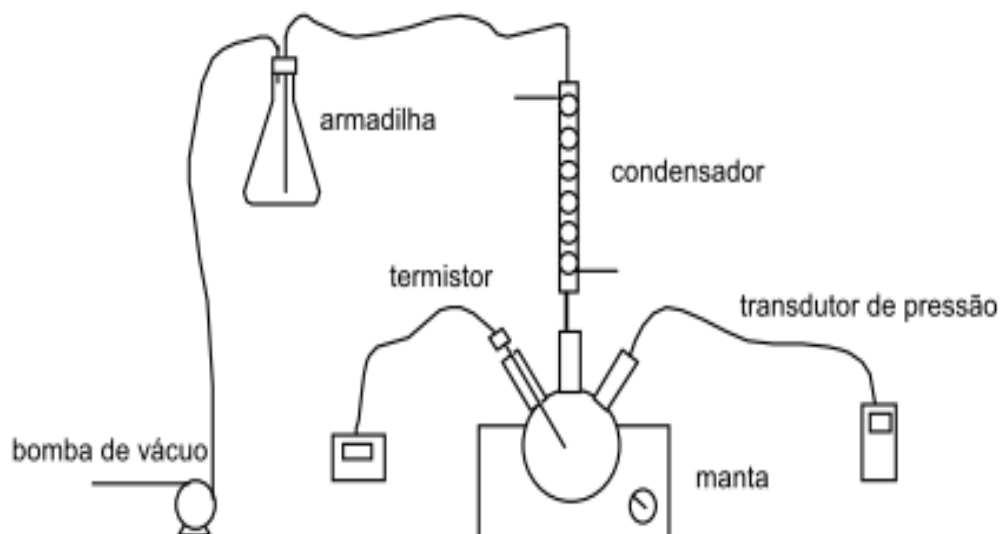


FIGURA 12 - DIAGRAMA ESQUEMÁTICO DO APARELHO UTILIZADO PARA MEDIDA DO PONTO DE EBULIÇÃO  
 FONTE: RODRIGUES (2010)

A Figura 23 ilustra de modo esquemático o aparelho empregado para determinação de temperaturas de ebulição. Essencialmente as medidas desta variável foram realizadas por aquecimento controlado do líquido cuja temperatura de ebulição deseja-se determinar. O calor requerido para ebulição foi fornecido por uma manta aquecedora com ajuste manual de temperatura. Na abertura central do balão foi conectado uma coluna de condensação para manter a composição do sistema constante e recondensar o solvente.

A pressão interna do sistema foi mantida fixa e controlada por uma válvula agulha e determinada por leituras em um transdutor de pressão. O monitoramento constante da temperatura, com o sensor de temperatura previamente calibrado, permite a identificação do ponto de ebulição, o qual será caracterizado por um estado de inalteração da temperatura do líquido, e corroborado por uma diferença apenas residual entre as temperaturas das fases. Uma vez alcançado o equilíbrio líquido-vapor foram realizadas 10 medidas de temperatura em intervalos regulares de 15 s. O ponto de ebulição foi determinado pela média aritmética dos valores obtidos.

#### 4.5.4 Modelagem da elevação do ponto de bolha de soluções de água e líquido iônico

Os dados experimentais obtidos no trabalho foram utilizados para estimar os parâmetros do modelo NRTL (Renon e Prausnitz, 1968) por meio da minimização da seguinte função objetivo:

$$fob = \sum_{k=1}^{NP} (T_k^{calc} - T_k^{exp})^2 \quad (28)$$

Onde NP é o número de pontos experimentais obtidos com cada líquido iônico, definidos pelas frações mássicas e pressões utilizadas no experimento,  $T_k^{calc}$  é a temperatura calculada para o ponto  $k$  e  $T_k^{exp}$  é a temperatura experimental no ponto  $k$ . No equilíbrio, a fugacidade da água na fase vapor deve ser a mesma da água na fase líquida, de forma que a seguinte restrição de igualdade foi considerada no processo de otimização:

$$f_{H2O,k}^V = f_{H2O,k}^L \quad k = 1, \dots, NP \quad (29)$$

Visto que os líquidos iônicos não são voláteis, considerou-se que a fase vapor apresentava unicamente água em sua composição. Desta Forma:

$$f_{H2O,k}^V = P_k \quad k = 1, \dots, NP \quad (30)$$

Onde  $P_k$  é a pressão experimental do vapor no ponto  $k$ , sendo então considerada a pressão parcial da água na fase vapor. A fugacidade da água na fase líquida em cada ponto foi calculada como:

$$f_{H2O,k}^L = x_{H2O,k} \cdot \gamma_{H2O,k} \cdot P_{H2O,k}^{sat} \quad k = 1, \dots, NP \quad (31)$$

Onde  $x_{H2O,k}$  é a fração molar experimental de água na fase líquida,  $\gamma_{H2O,k}$  é o coeficiente de atividade da água calculado na fase líquida e  $P_{H2O,k}^{sat}$  é a pressão de vapor da água pura obtida a partir de  $T_k^{calc}$ . O coeficiente de atividade da água na fase líquida foi calculado pelo modelo de Gibbs de Excesso NRTL, como uma

função dos parâmetros de interação binários ( $\frac{\Delta g_{i,j}}{R}$ ,  $\frac{\Delta g_{j,i}}{R}$  e  $\alpha_{i,j}$ ), da fração molar de água na fase líquida ( $x_{H_2O,k}$ ) e da temperatura de ebulição calculada ( $T_k^{calc}$ ). A pressão de vapor da água foi calculada de acordo com equação fornecida pelo banco de dados DIADDEM (2000).

Para o cálculo da fração molar foram adotados os seguintes pesos moleculares:

TABELA 12 - PESO MOLECULAR DOS LÍQUIDOS IÔNICOS

PESO MOLECULAR (g/mol)			
2HDEAA	2HDEAPR	2HDEAB	2HDEAPE
165,18760	179,21418	193,24076	207,26734

Durante o processo de minimização, os parâmetros de interação NRTL ( $\frac{\Delta g_{i,j}}{R}$  e  $\frac{\Delta g_{j,i}}{R}$ ) e as temperaturas calculadas ( $T_k^{calc}$ ) foram consideradas as variáveis de decisão. O parâmetro  $\alpha_{i,j}$  foi fixado em 0,2. O processo de otimização foi realizado com a ferramenta “solver”, incluída no software Excel 2010 para Windows. Os coeficientes de atividade foram calculados com auxílio do suplemento XSEOS para Excel, desenvolvido por Castier (2008).

## 5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

### 5.1 PURIFICAÇÃO

As amostras de LI foram pesadas antes e depois da rotaevaporação, não sendo detectado alteração em seus pesos. Bem como, não foi observado visualmente a presença de água ou outros solventes no balão.

### 5.2 TEOR DE ÁGUA

Em geral os LIs apresentam caráter hidrofílico, e isto pode influenciar diretamente na determinação das propriedades físico-químicas.

A Tabela 13 apresenta o teor de água encontrado nas amostras analisadas de LI puros.

TABELA 13 - PORCENTAGEM DE ÁGUA PRESENTE NOS LÍQUIDOS IÔNICOS

LÍQUIDO IÔNICO	TEOR DE ÁGUA (% EM MASSA)
2HDEAA	3.43
2HDEAPr	2.32
2HDEAB	1.24
2HDEAPe	1.87

Para os LIs estudados neste trabalho observa-se uma redução do teor de água em função do aumento da cadeia aniônica.

### 5.3 VISCOSIDADE

#### 5.3.1 Líquidos iônicos

Dos cinco modelos propostos, os LIs podem ser representados pelo modelo de Newton, Lei da Potência e Herschel-Bulkley. Dependendo da concentração e

temperatura da solução um modelo pode ser mais adequado do que o outro, entretanto os erros obtidos são semelhantes.

Para apresentação dos resultados e modelagem no presente trabalho, foi adotado tanto para o LI puro quanto suas soluções o comportamento newtoniano.

Os LIs puros apresentam viscosidades elevadas, sendo que o 2HDEAA é o mais viscoso e o 2HDEAPE o menos viscoso, conforme apresentado na Tabela 14.

TABELA 14 - VISCOSIDADE DOS LÍQUIDOS IÔNICOS PUROS À TEMPERATURA AMBIENTE (293,15 K)

VISCOSIDADE (Cp)			
2HDEAA	2HDEAPR	2HDEAB	2HDEAPE
3586,51±0,08	2489,84±0,12	2391,46±0,07	1308,76±0,03

A redução da viscosidade com o aumento da cadeia aniônica é observada em todas as temperaturas. E a partir da temperatura de 323,15 K a diferença da viscosidade de um LI para outro não é muito significativa, de acordo com a Figura 24.

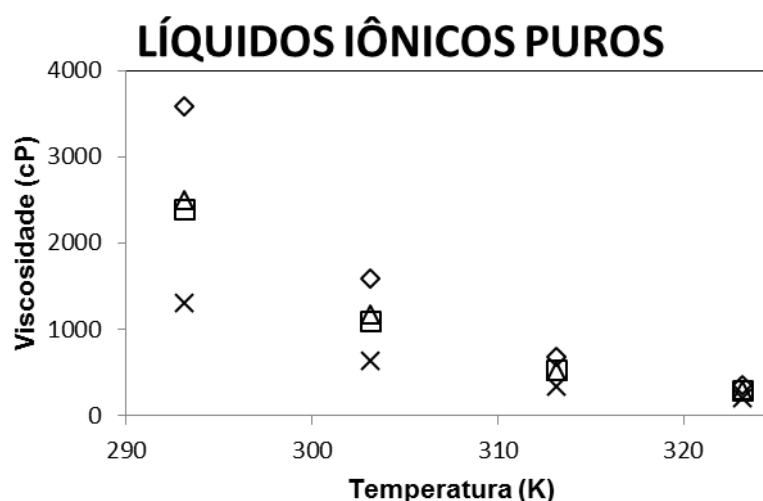


FIGURA 13 - CURVAS DE VISCOSIDADE EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA PARA OS LÍQUIDOS IÔNICOS PUROS: (◇) 2-HIDROXI DIETILAMÔNIO ACETATO (2HDEAA); (Δ) 2-HIDROXI DIETILAMÔNIO PROPINOATO (2HDEAPR); (□) 2-HIDROXI DIETILAMÔNIO BUTANOATO (2HDEAB); (X) 2-HIDROXI DIETILAMÔNIO PENTANOATO (2HDEAPE).  
FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

Na literatura relata-se que a viscosidade geralmente aumenta com o aumento da cadeia catiônica, portanto era esperado que as viscosidades dos LIs a base de dietilamônio estivesse numa faixa entre as viscosidade dos LIs a base de etilamônio e trietilamônio. Porém, comparando as viscosidades dos LIs puros na temperatura

de 323,15 K com os resultados obtidos nos trabalhos de Croscato (2013) e Moraes (2013), observa-se que esta condição não é obedecida. Na Tabela 15 é observado que os LIs a base de dietilamônio apresentam viscosidades superiores a base trietilamônio.

TABELA 15 - COMPARTIVO DOS RESULTADOS DE VISCOSIDADES DOS LÍQUIDOS IÔNICOS PUROS EM FUNÇÃO DA CADEIA CATIÔNICA A TEMPERATURA DE 323,15 K

VISCOSIDADE (cP)							
CADEIA ANIÔNICA							
ACETATO		PROPINOATO		BUTANOATO		PENTANOATO	
m-2HEAA(*)	108	m-2HEAPr(*)	068	m-2HEAB(*)	077	m-2HEAPe(*)	074
2HDEAA	354	2HDEAPr	296	2HDEAB	292	2DTEAPe	203
2HTEAA(**)	316	2HTEAPr(**)	248	2HTEAB(**)	234	2HTEAPe(**)	201

FONTE: (\*) CROSCATO (2013)  
(\*\*) MORAES (2013)

Para as misturas binárias de líquidos iônicos e água, observa-se uma redução significativa na viscosidade com a adição de água ao sistema, conforme verificado nas Figuras 25 a 28. Os quatro LIs apresentam comportamento semelhante, com adição de apenas 15% de água ao LI puro, há uma redução no valor da viscosidade em aproximadamente 90%.

### ÁGUA(1) + 2HDEAA(2)

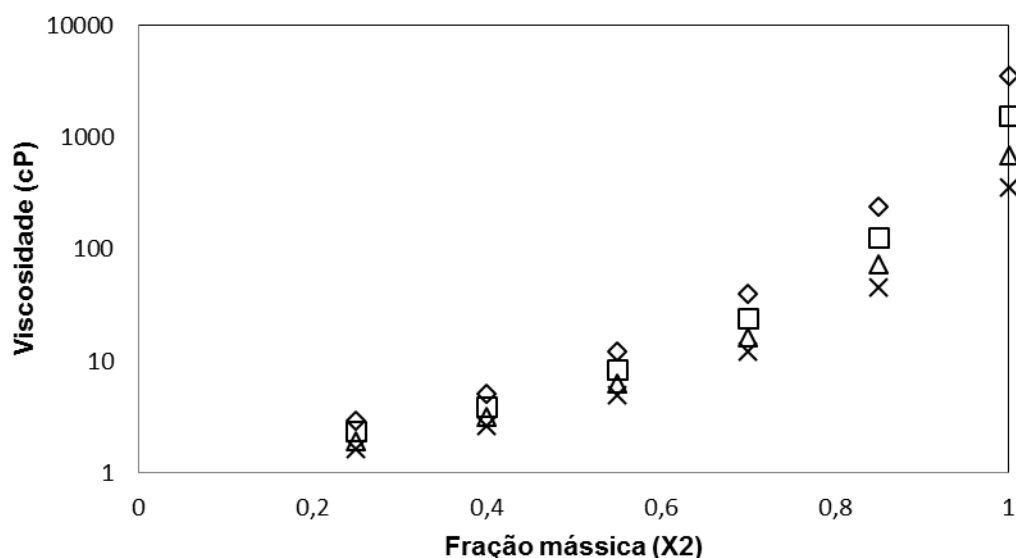


FIGURA 25 - RESULTADOS DA VISCOSIDADE PARA A MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAA(2): (◇) 293,15 K, (□) 303,15 K, (Δ) 313,15 K E (X) 323,15 K  
FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

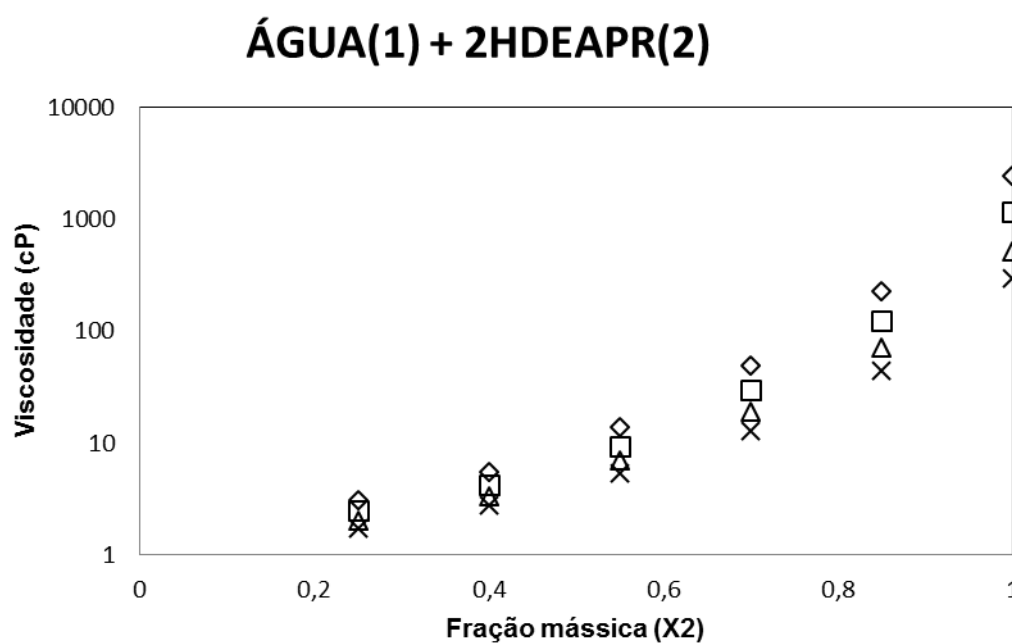


FIGURA 14 - RESULTADOS DA VISCOSIDADE PARA A MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAPR(2): (◇) 293,15 K, (□) 303,15 K, (Δ) 313,15 K E (X) 323,15 K  
 FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

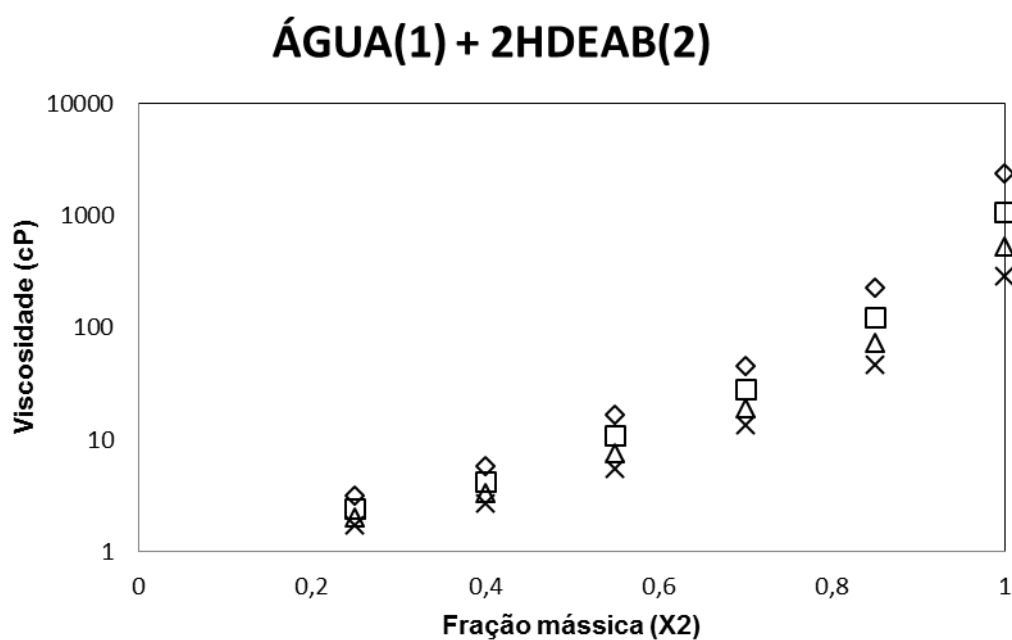


FIGURA 15 - RESULTADOS DA VISCOSIDADE PARA A MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAB(2): (◇) 293,15 K, (□) 303,15 K, (Δ) 313,15 K E (X) 323,15 K  
 FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.



### ÁGUA(1) + 2HDEAPE(2)

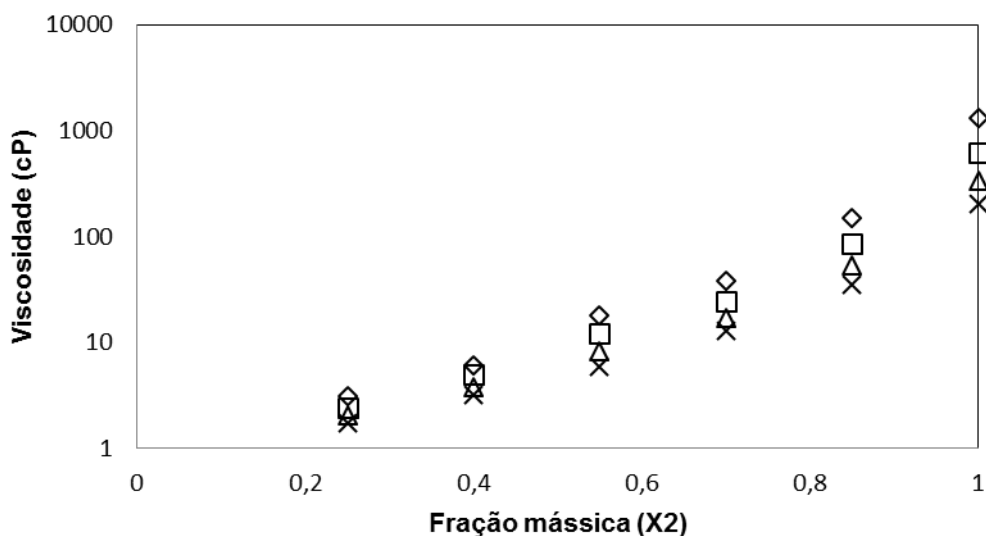


FIGURA 16 - RESULTADOS DA VISCOSIDADE PARA A MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAPE(2): (◇) 293,15 K, (□) 303,15 K, (Δ) 313,15 K E (X) 323,15 K  
FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

Para as misturas binárias de líquidos iônicos e água, apresentadas nas Figuras 29 a 32, observa-se uma redução na viscosidade com o aumento da temperatura. Os quatro LIs apresentam comportamento semelhante, na temperatura de 323,15 K a viscosidade é aproximadamente 50% menor que a viscosidade a temperatura ambiente.

### ÁGUA(1) + 2HDEAA(2)

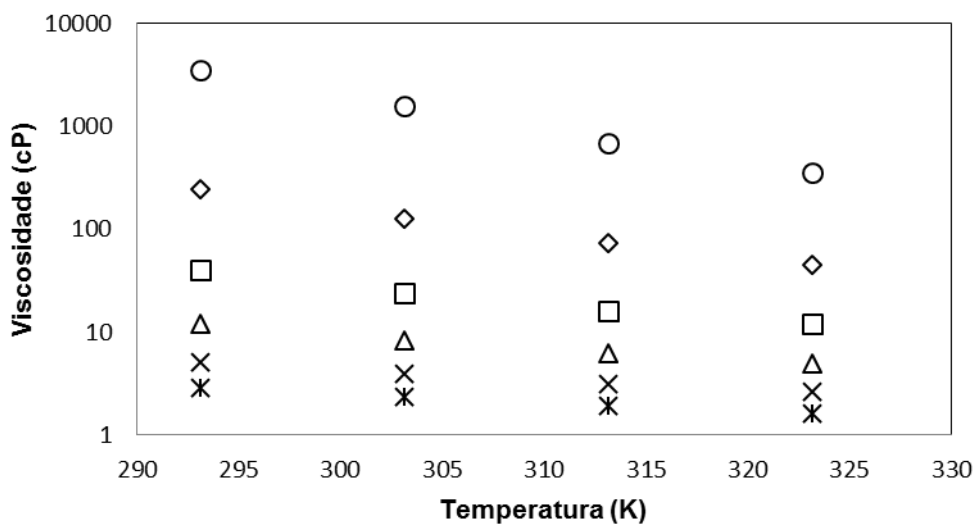


FIGURA 29 - RESULTADOS DA VISCOSIDADE PARA A MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAA(2) EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA: (O) X2=1.0, (◇) X2=0.85, (□) X2=0.70, (Δ) X2=0.55, (X) X2=0.40, (Ж) X2=0.25  
FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

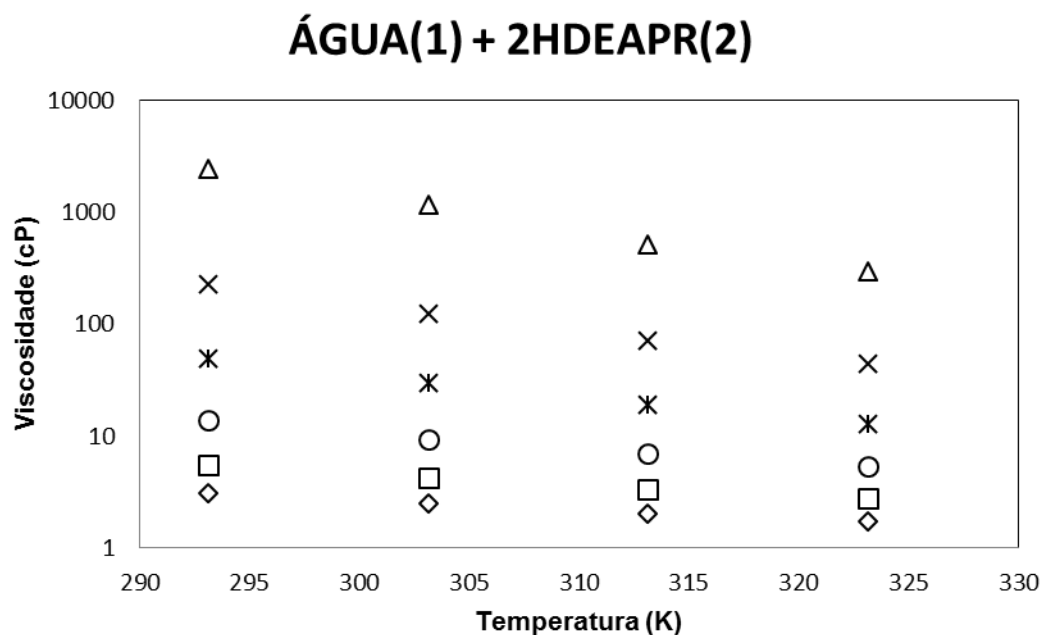


FIGURA 30 - RESULTADOS DA VISCOSIDADE PARA A MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAPR(2) EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA: (Δ) X<sub>2</sub>=1.0, (X) X<sub>2</sub>=0.85, (\*) X<sub>2</sub>=0.70, (O) X<sub>2</sub>=0.55, (□) X<sub>2</sub>=0.40, (◇) X<sub>2</sub>=0.25  
 FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

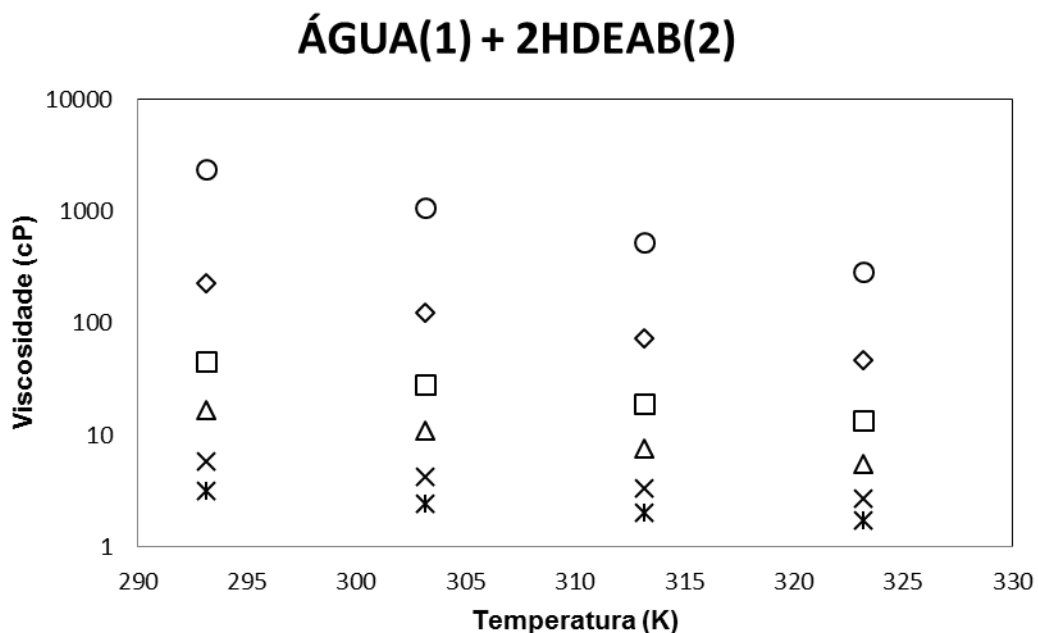


FIGURA 31 - RESULTADOS DA VISCOSIDADE PARA A MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAB(2) EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA: (O) X<sub>2</sub>=1.0, (◇) X<sub>2</sub>=0.85, (□) X<sub>2</sub>=0.70, (Δ) X<sub>2</sub>=0.55, (X) X<sub>2</sub>=0.40, (\*) X<sub>2</sub>=0.25  
 FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

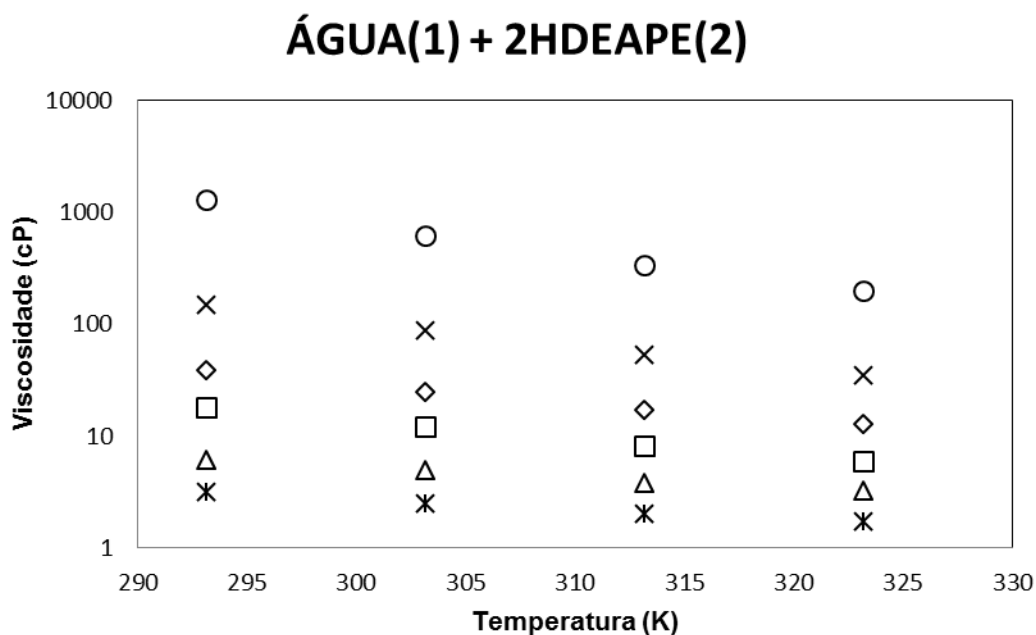


FIGURA 32 - RESULTADOS DA VISCOSIDADE PARA A MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAPE(2) EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA: (O) X<sub>2</sub>=1.0, (X) X<sub>2</sub>=0.85, (◊) X<sub>2</sub>=0.70, (◻) X<sub>2</sub>=0.55, (Δ) X<sub>2</sub>=0.40, (✱) X<sub>2</sub>=0.25  
 FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

### 5.3.2 Modelagem

Utilizando a equação (11) descrita anteriormente, foram obtidos os parâmetros e erros das equações para a viscosidade, que são apresentados nas Equações (32) a (35). Todos os ajustes forneceram correlações ( $R^2$ ) acima de 0.99, conforme tabela 16.

TABELA 16 - VALOR DAS CONSTANTES PARA CADA MISTURA DE ÁGUA + LI, E SUAS RESPECTIVAS CORRELAÇÕES.

	A	B	C	$R^2$
2HDEAA	$5,7963 \times 10^{-7}$	16,07260	6584,7894	0,9930
2HDEAPr	$21,6608 \times 10^{-7}$	14,2179	6086,7757	0,9903
2HDEAB	$50,1813 \times 10^{-7}$	13,9500	5828,6446	0,9903
2HDEAPE	$9,5329 \times 10^{-7}$	12,8861	6166,2738	0,9983

O comportamento da viscosidade para as misturas Água + LI em função da fração mássica e da temperatura é observado nas Figuras 33 a 40.

ÁGUA(1) + 2HDEAA(2)

$$\mu = 5,7963 \cdot 10^{-7} X^{16,07260} \cdot \exp\left(\frac{6584,7894}{T}\right) \quad (32)$$

$$R^2=0.9930$$

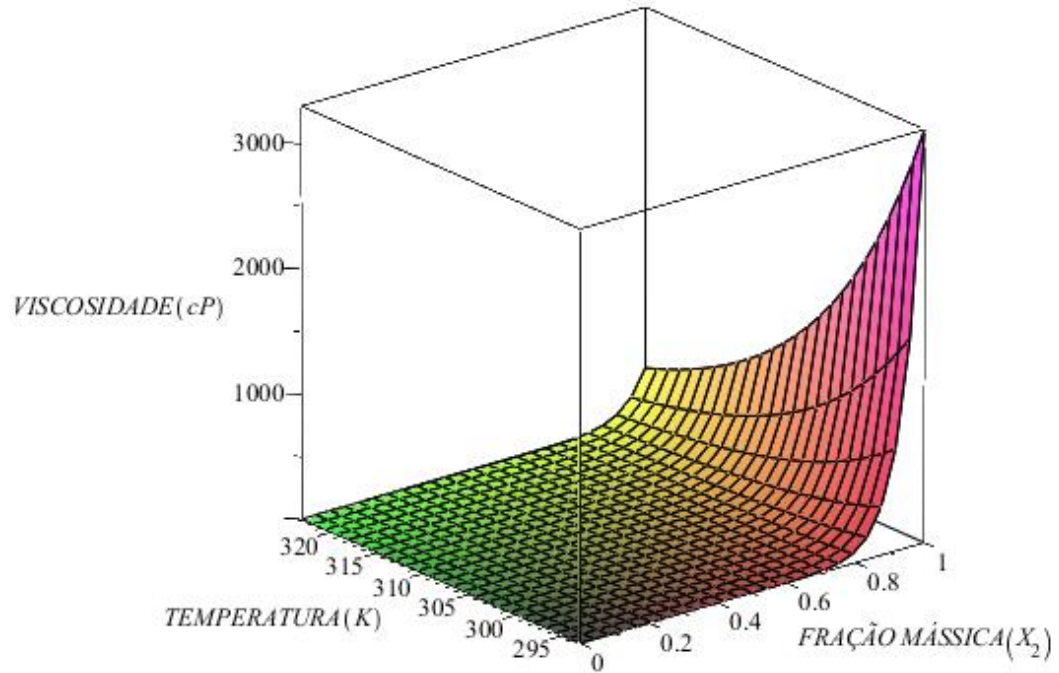


FIGURA 33 - VISCOSIDADE (cP) PARA A MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAA(2) EM FUNÇÃO DA FRAÇÃO MÁSSICA ( $X_2$ ) E DA TEMPERATURA (K)  
FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

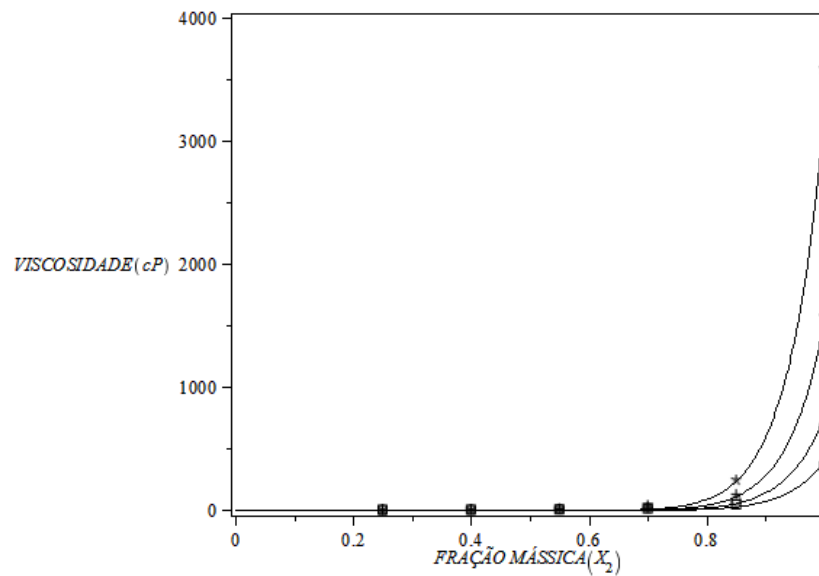


FIGURA 34 - COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS COM O MODELO PROPOSTO (-) PARA A MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAA(2), PARA AS SEGUINTE TEMPERATURAS: (\*) 293,15 K, (+) 303,15 K, (o) 313,15 K E (□) 323,15 K.  
FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

ÁGUA(1) + 2HDEAPr(2)

$$\mu = 21,6608 \cdot 10^{-7} X^{14,2179} \cdot \exp\left(\frac{6086,7757}{T}\right) \quad (33)$$

$$R^2=0.9903$$

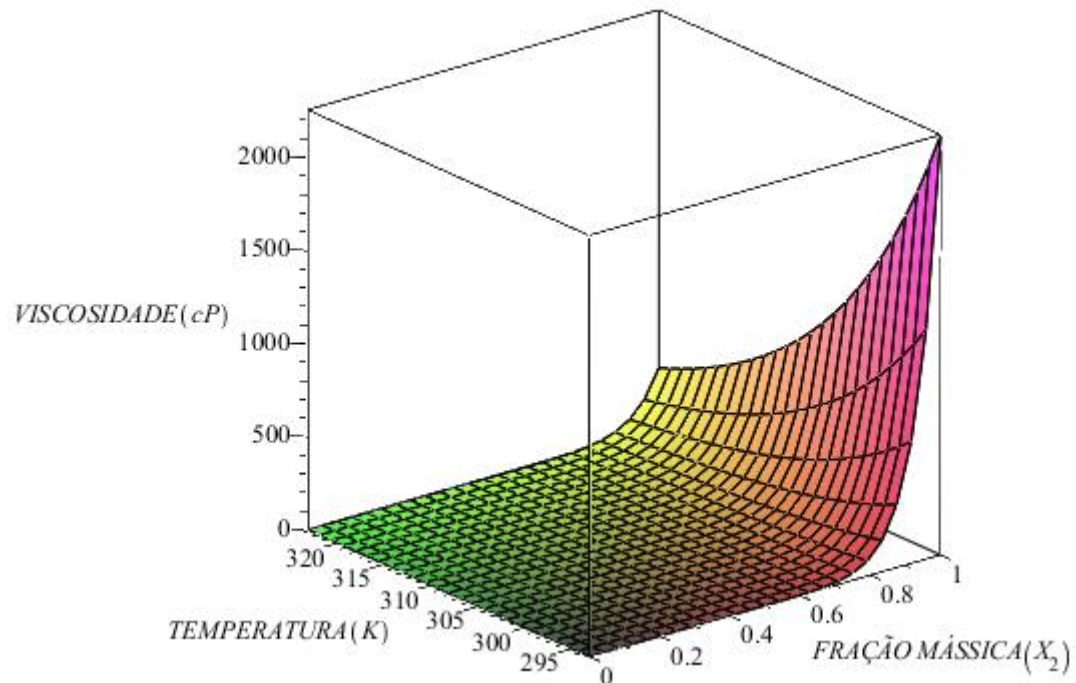


FIGURA 35 - VISCOSIDADE (cP) PARA A MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAPr(2) EM FUNÇÃO DA FRAÇÃO MÁSSICA (X<sub>2</sub>) E DA TEMPERATURA (K)  
FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

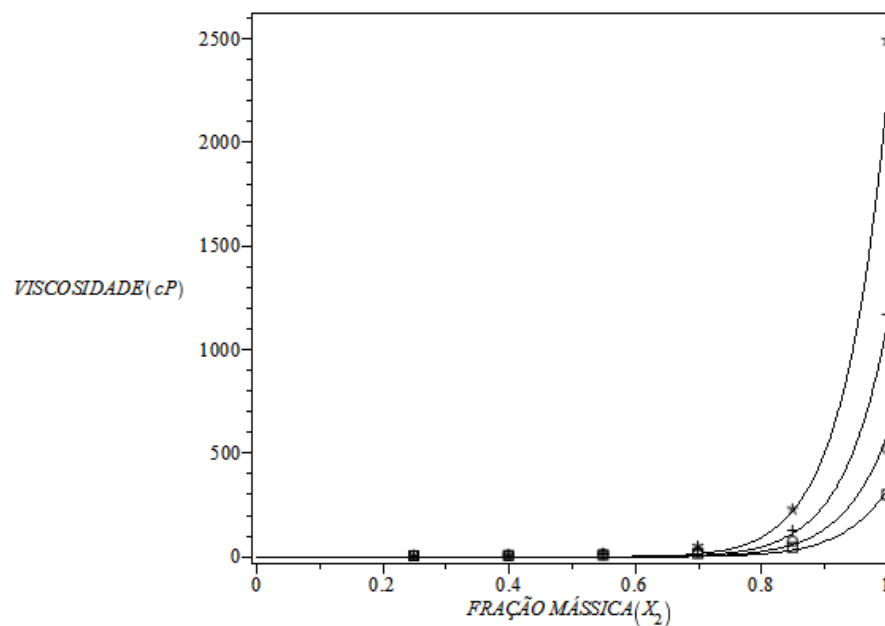


FIGURA 17 - COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS COM O MODELO PROPOSTO (-) PARA A MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAPr(2), PARA AS SEGUINTE TEMPERATURAS: (\*) 293,15 K, (+) 303,15 K, (o) 313,15 K E (□) 323,15 K.  
FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

ÁGUA(1) + 2HDEAB(2)

$$\mu = 50,1813 \cdot 10^{-7} X^{13,95} \cdot \exp\left(\frac{5828,6446}{T}\right) \quad (34)$$

$$R^2 = 0.9903$$

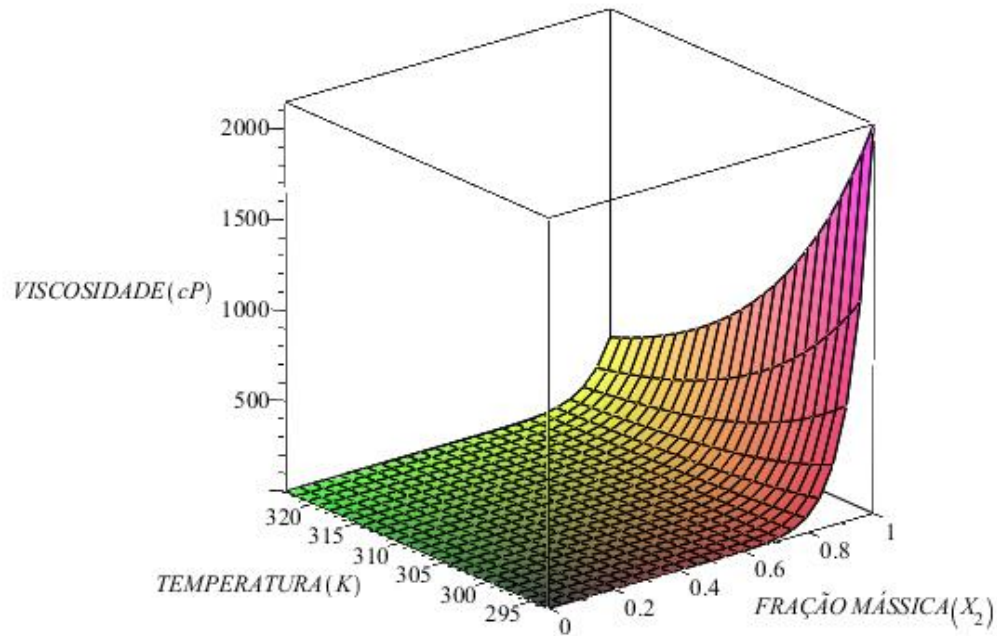


FIGURA 18 -VISCOSIDADE (cP) PARA A MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAB(2) EM FUNÇÃO DA FRAÇÃO MÁSSICA ( $X_2$ ) E DA TEMPERATURA (K)  
 FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

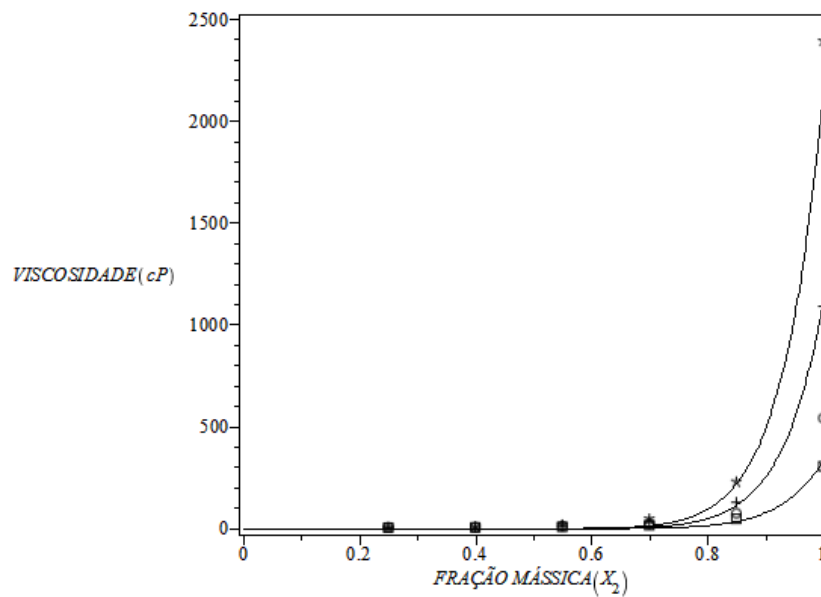


FIGURA 19 - COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS COM O MODELO PROPOSTO (-) PARA A MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAB(2), PARA AS SEGUINTE TEMPERATURAS: (\*) 293,15 K, (+) 303,15 K, (o) 313,15 K E (□) 323,15 K.  
 FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

ÁGUA(1) + 2HDEAPE(2)

$$\mu = 9,5329 \cdot 10^{-7} X^{12,8861} \cdot \exp\left(\frac{6166,2738}{T}\right) \quad (35)$$

$$R^2 = 0.9983$$

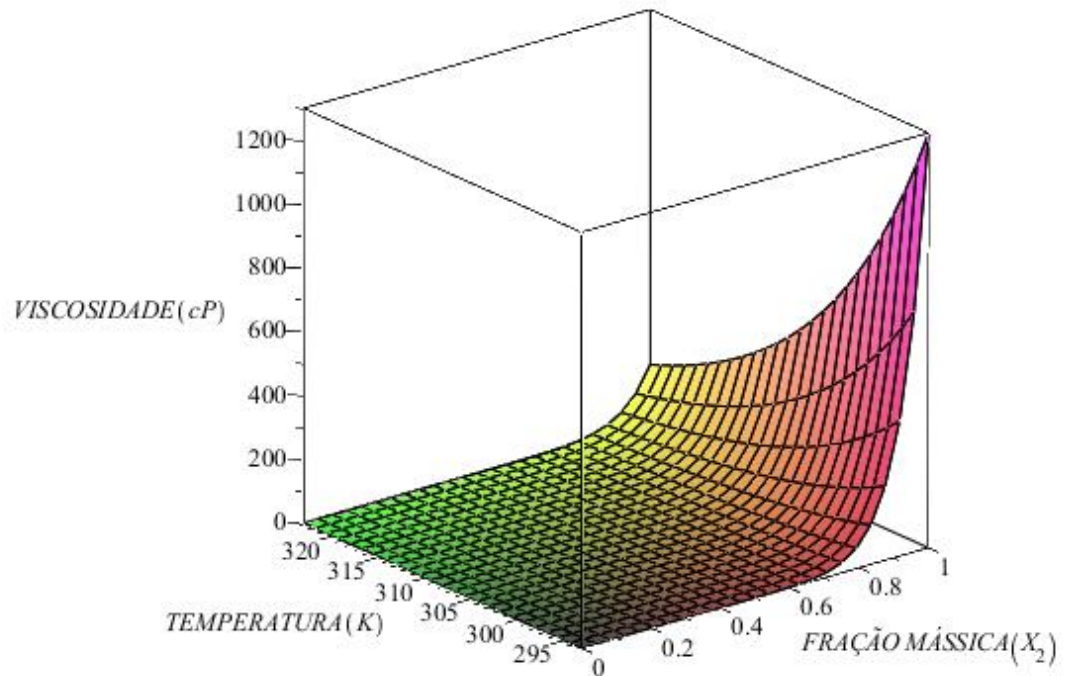


FIGURA 39 -VISCOSIDADE (cP) PARA A MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAPE(2) EM FUNÇÃO DA FRAÇÃO MÁSSICA (X<sub>2</sub>) E DA TEMPERATURA (K)  
FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

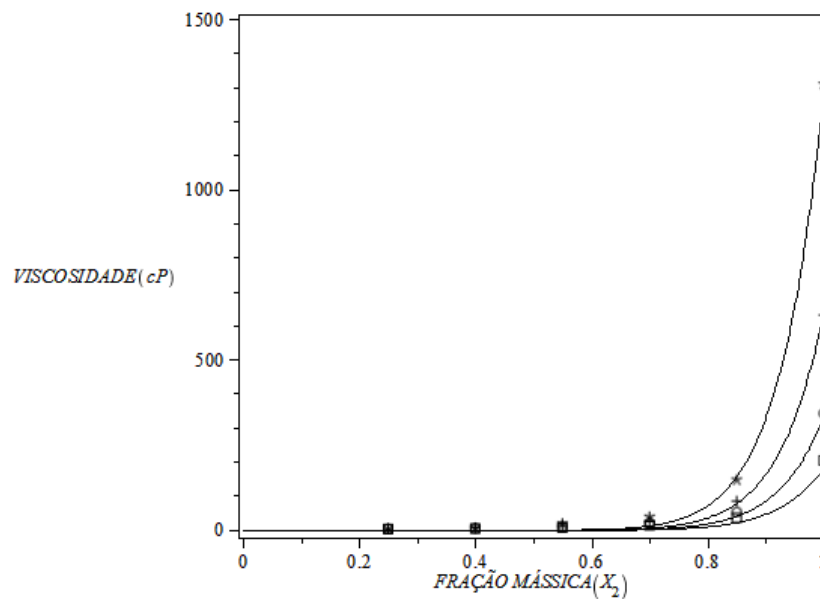


FIGURA 40 - COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS COM O MODELO PROPOSTO (-) PARA A MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAPE(2), PARA AS SEGUINTE TEMPERATURAS: (\*) 293,15 K, (+) 303,15 K, (o) 313,15 K E (□) 323,15 K..  
FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

De acordo com o modelo, o LI 2HDEAPe na temperatura de 298.15 K apresenta a viscosidade de 914 cP, enquanto Iglesias et al (2010) relata uma viscosidade de 803 cP nesta mesma temperatura.

## 5.4 DENSIDADE

### 5.4.1 Líquidos iônicos

A densidade dos LIs puros diminui com o aumento da cadeia aniônica, sendo o 2HDEAA é o mais denso e o 2HDEAPe o menos denso, conforme observado na Tabela 17.

TABELA 17 - DENSIDADE DOS LÍQUIDOS IÔNICOS PUROS À TEMPERATURA AMBIENTE (293,15 K)

DENSIDADE (g/cm <sup>3</sup> )			
2HDEAA	2HDEAPR	2HDEAB	2HDEAPE
1,177029	1,142780	1,107627	1,073388

Na Figura 41, verifica-se a redução da densidade com o aumento da cadeia aniônica é observada em todas as temperaturas.

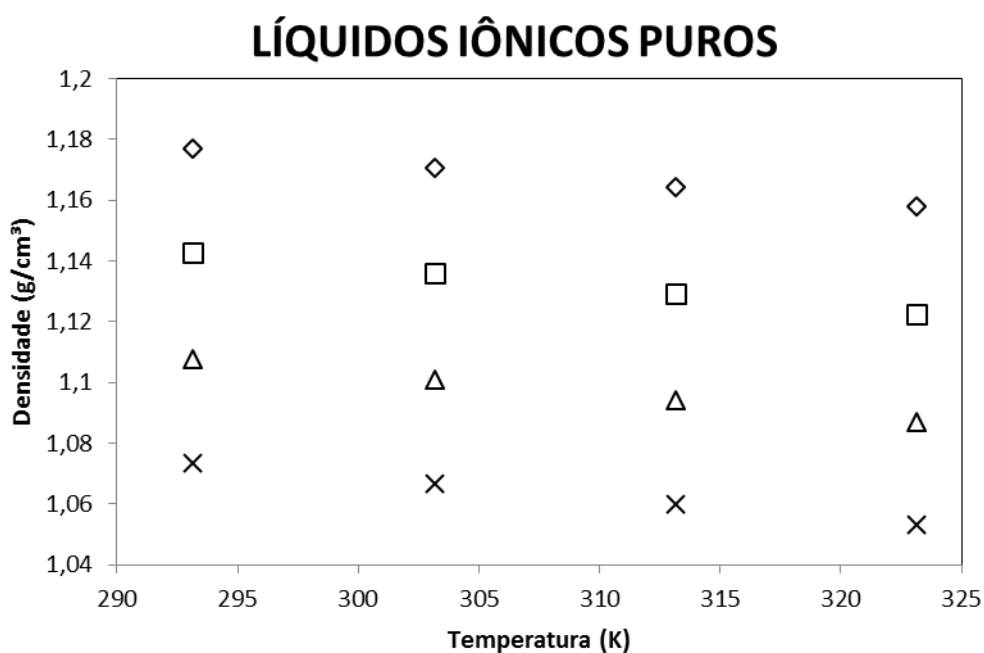


FIGURA 41 - RESULTADOS DA DENSIDADE DOS LÍQUIDOS IÔNICOS PUROS: (◇) 2HDEAA, (□) 2HDEAPR, (Δ) 2HDEAB, (X) 2HDEAPE  
 FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.



De acordo com a literatura a densidade deve aumentar com o aumento da cadeia catiônica, portanto era esperado que a densidade dos LIs a base de dietilamônio estivesse numa faixa entre as densidade dos LIs a base de etilamônio e trietilamônio. E isto se confirma, através da Figura 42 a 45, quando comparado os resultados aqui obtidos com resultados dos trabalhos de Croscato (2013) e Moraes (2013).

### Base aniônica - Acetato

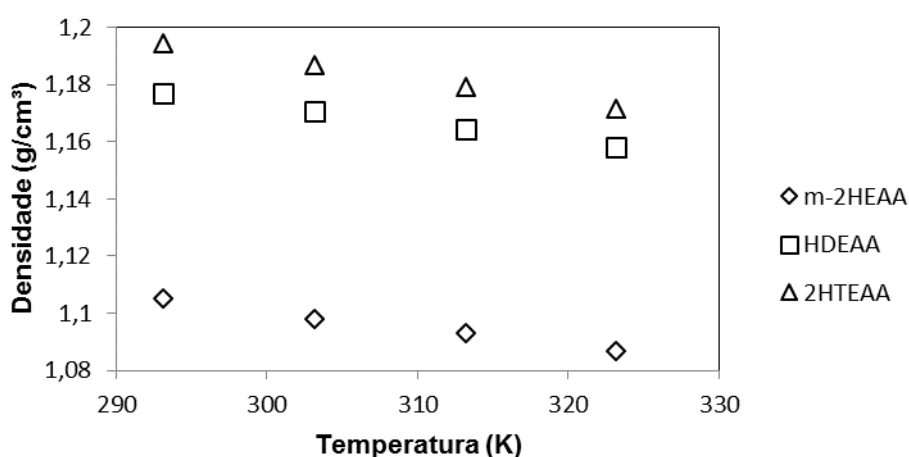


FIGURA 42 - RESULTADOS DA DENSIDADE DOS LÍQUIDOS IÔNICOS COM A MESMA BASE ANIÔNICA - ACETATO: (◇) m-2HEAA(\*), (□) 2HDEAA, (Δ) 2HTEAA(\*\*)  
 FONTE: (\*) CROSCATO (2013)  
 (\*\*)MORAES (2013)

### Base aniônica - Propinoato

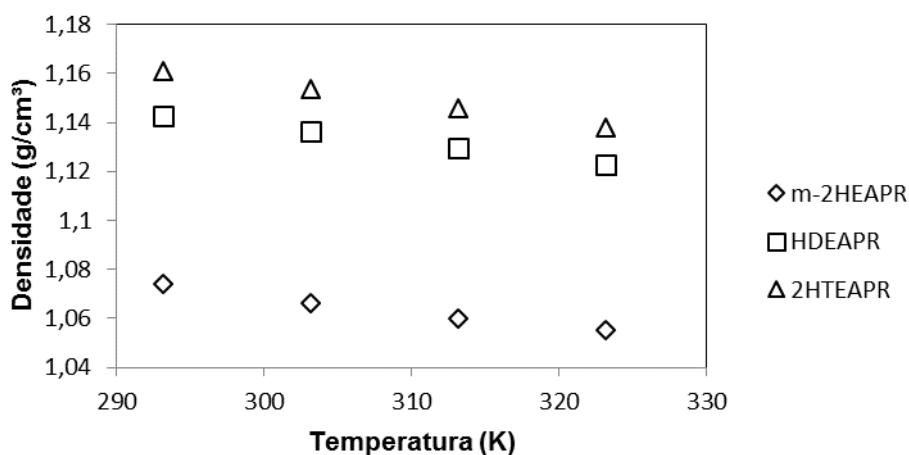


FIGURA 43 - RESULTADOS DA DENSIDADE DOS LÍQUIDOS IÔNICOS COM A MESMA BASE ANIÔNICA - PROPINOATO: (◇) m-2HEAPR(\*), (□) 2HDEAPR, (Δ) 2HTEAPR(\*\*)  
 FONTE: (\*) CROSCATO (2013)  
 (\*\*)MORAES (2013)

### Base aniônica - Butanoato

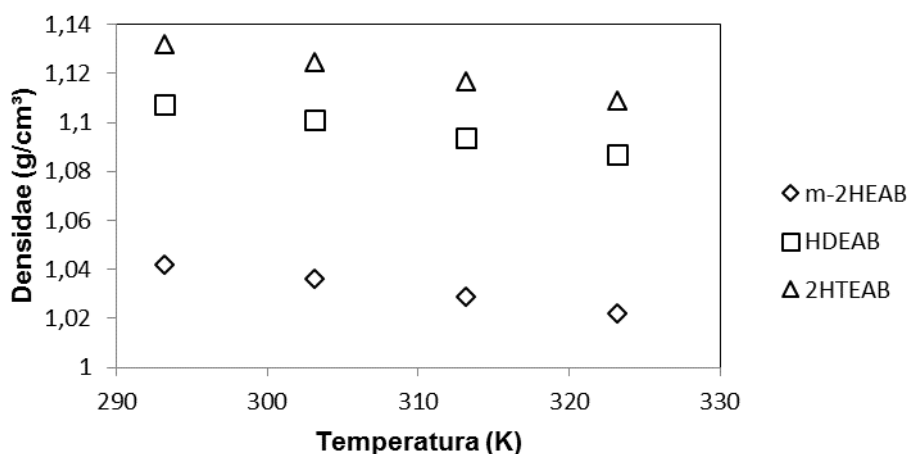


FIGURA 44 - RESULTADOS DA DENSIDADE DOS LÍQUIDOS IÔNICOS COM A MESMA BASE ANIÔNICA - BUTANOATO: (◇) m-2HEAB(\*), (□) 2HDEAB, (Δ) 2HTEAB(\*\*)  
 FONTE: (\*) CROSCATO (2013)  
 (\*\*)MORAES (2013)

### Base aniônica - Pentanoato

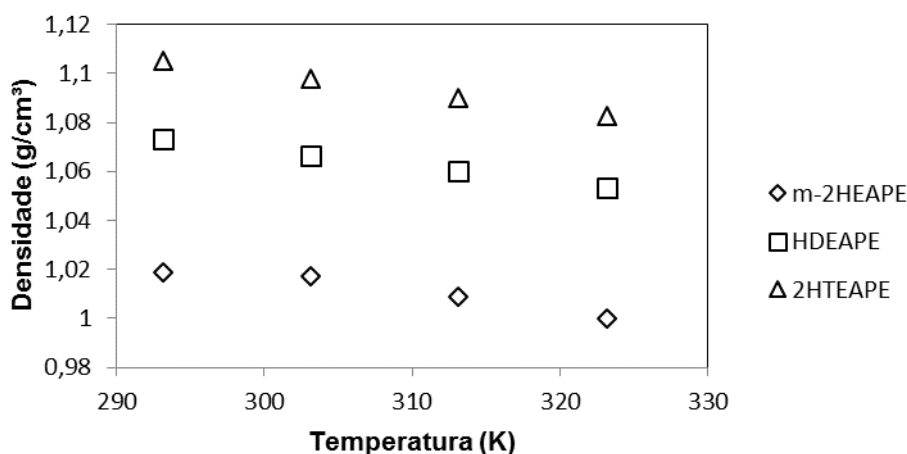


FIGURA 45 - RESULTADOS DA DENSIDADE DOS LÍQUIDOS IÔNICOS COM A MESMA BASE ANIÔNICA - PENTANOATO: (◇) m-2HEAPE(\*), (□) 2HDEAPE, (Δ) 2HTEAPE(\*\*)  
 FONTE: (\*) CROSCATO (2013)  
 (\*\*)MORAES (2013)

Os LIs: 2HDEAA, 2HDEAPr e 2HDEAB quando misturados com água apresentam comportamento semelhante. Observa-se uma redução da densidade com o aumento da temperatura e o aumento da densidade com o aumento da fração mássica de LI, conforme Figuras 46 a 49.

A densidade do 2HDEAPE também diminui com o aumento da temperatura, porém não há um aumento para todas as frações mássicas. Inicialmente conforme

aumenta a fração de LI, a densidade também aumenta, chegando a uma densidade máxima próximo a fração de 0,85. Acima deste valor a densidade diminui, conforme figura 49.

Para análise da densidade do LI 2HDEAB, fração mássica igual a 0,25 houve a formação de bolhas de ar acima de 313,15 K. Sendo necessário a injeção de nova amostra no densímetro. A formação de bolhas de ar é devido a grande quantidade de água na amostra.

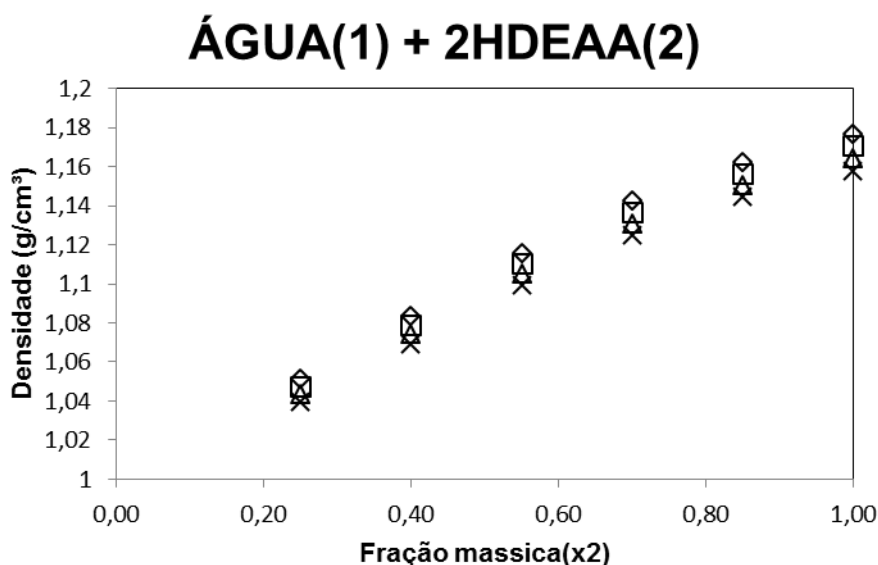


FIGURA 46 - RESULTADOS DA DENSIDADE PARA A MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAA(2) NAS TEMPERATURAS DE: (◇) 293,15 K, (□) 303,15 K, (Δ) 313,15 K, (X) 323,15 K  
FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

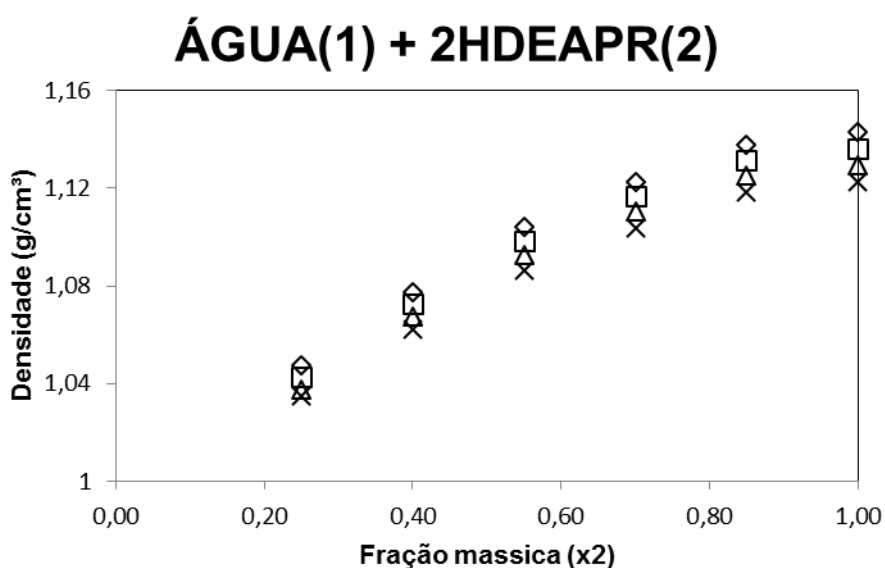


FIGURA 47 - RESULTADOS DA DENSIDADE PARA A MISTURA BINÁRIA 2ÁGUA(1) + HDEAPR(2) NAS TEMPERATURAS DE: (◇) 293,15 K, (□) 303,15 K, (Δ) 313,15 K, (X) 323,15 K  
FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

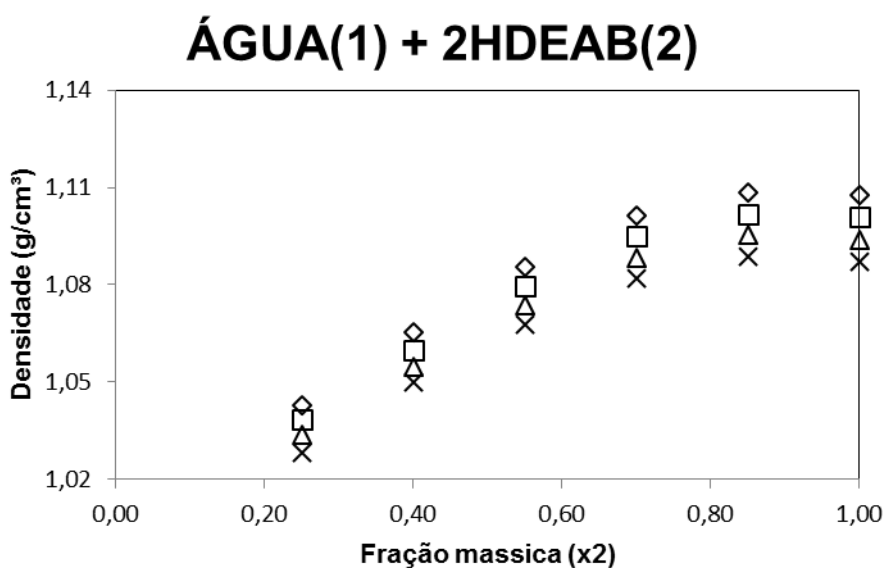


FIGURA 48 - RESULTADOS DA DENSIDADE PARA A MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAB(2) NAS TEMPERATURAS DE: (◇) 293,15 K, (□) 303,15 K, (Δ) 313,15 K, (X) 323,15 K  
 FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

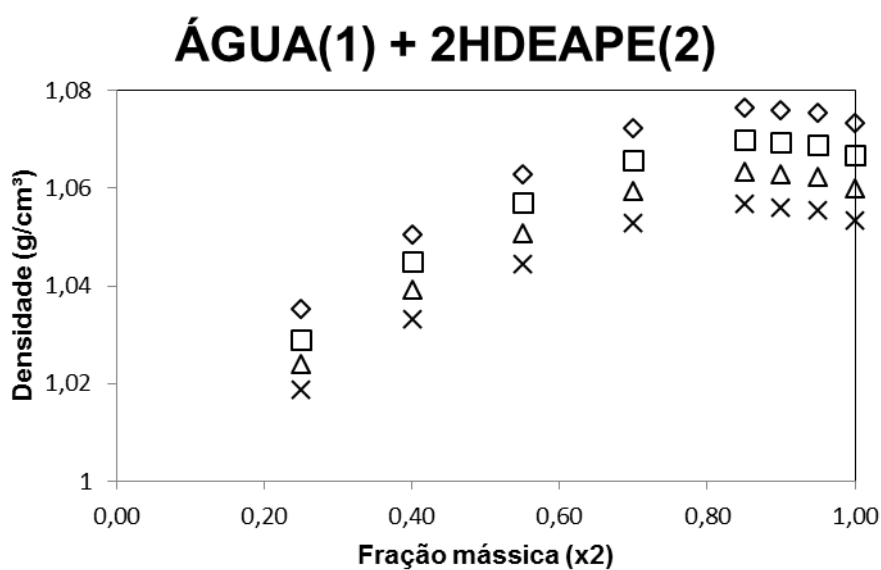


FIGURA 20 - RESULTADOS DA DENSIDADE PARA A MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAPE(2) NAS TEMPERATURAS DE: (◇) 293,15 K, (□) 303,15 K, (Δ) 313,15 K, (X) 323,15 K  
 FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

#### 5.4.2 Modelagem

Utilizando a equação (23) descrita anteriormente, foram obtidos os parâmetros e erros das equações para a densidade, que são apresentados nas

equações (36) a (39). O ajuste das equações forneceu correlações ( $R^2$ ) acima de 0.99, conforme observado na tabela 18.

TABELA 18 - VALOR DAS CONSTANTES PARA CADA MISTURA DE ÁGUA + LI, E SUAS RESPECTIVAS CORRELAÇÕES.

	A	B	C	D	$R^2$
2HDEAA	0,8189	-0,0762	0,2576	52,0957	0,9979
2HDEAPr	0,8030	-0,1023	0,2498	56,7720	0,9967
2HDEAB	0,8033	-0,1101	0,2208	57,0564	0,9958
2HDEAPe	0,8014	-0,0947	0,1686	58,1555	0,9973

O comportamento da densidade para as misturas Água + LI em função da fração mássica e da temperatura é observado nas Figuras 50 a 57.

ÁGUA(1) + 2HDEAA(2)

$$\rho = 0.8189 - 0.0762X_2^2 + 0.2576X_2 + \frac{52.0957}{T} \quad (36)$$

$$R^2 = 0.9979$$

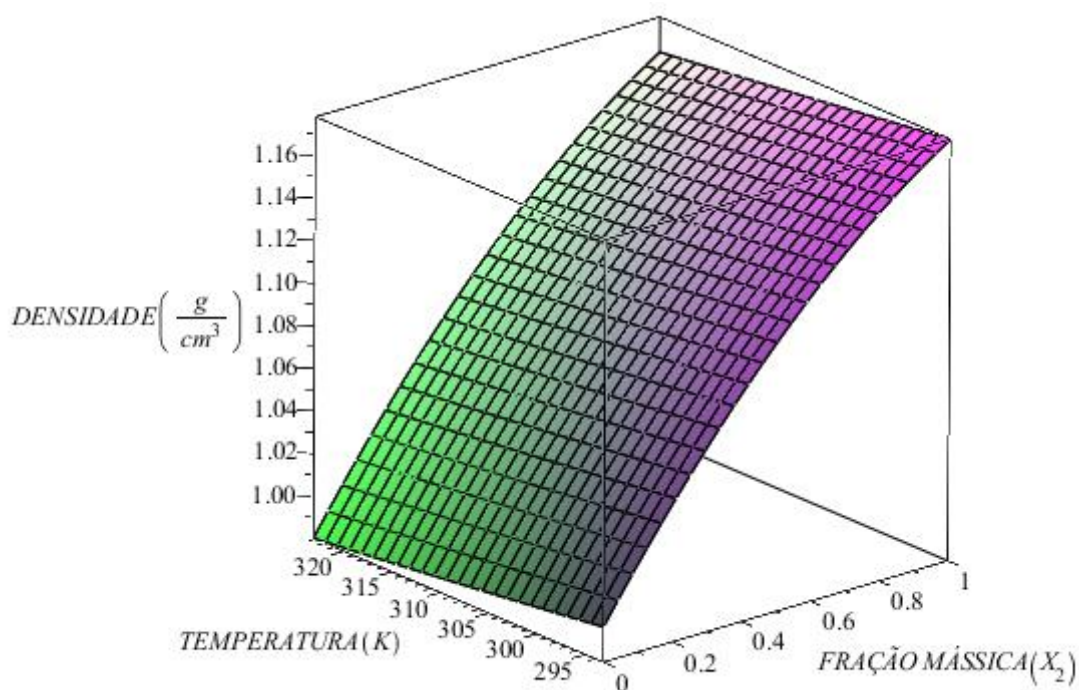


FIGURA 50 - DENSIDADE ( $\text{g/cm}^3$ ) PARA A MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAA(2) EM FUNÇÃO DA FRAÇÃO MÁSSICA ( $X_2$ ) E DA TEMPERATURA (K).  
FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

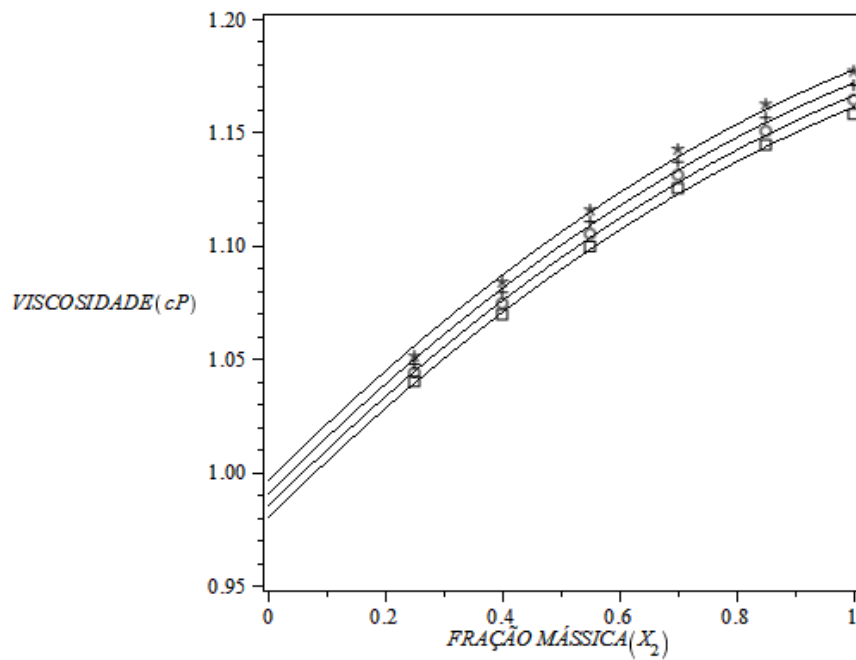


FIGURA 51 - COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS COM O MODELO PROPOSTO (-) PARA A MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAA(2), PARA AS SEGUINTE TEMPERATURAS: (\*) 293,15 K, (+) 303,15 K, (o) 313,15 K E (□) 323,15 K.  
FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

ÁGUA(1) + 2HDEAPr(2)

$$\rho = 0.8030 - 0.1023X_2^2 + 0.2498X_2 + \frac{56.7720}{T} \quad (37)$$

$$R^2 = 0.9967$$

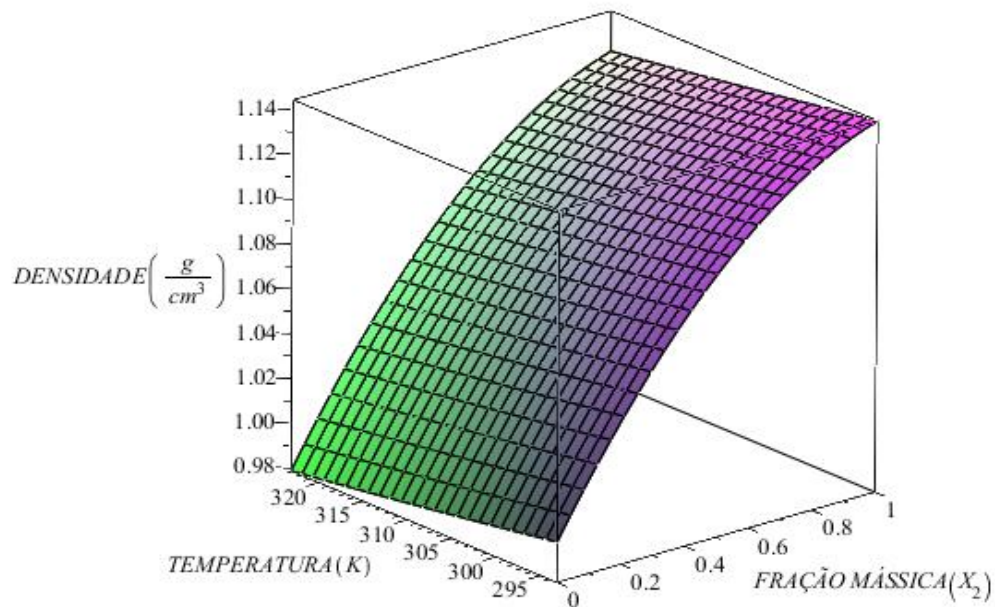


FIGURA 52 -DENSIDADE (cP) PARA A MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAPr(2) EM FUNÇÃO DA FRAÇÃO MÁSSICA (X2) E DA TEMPERATURA (K)  
FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

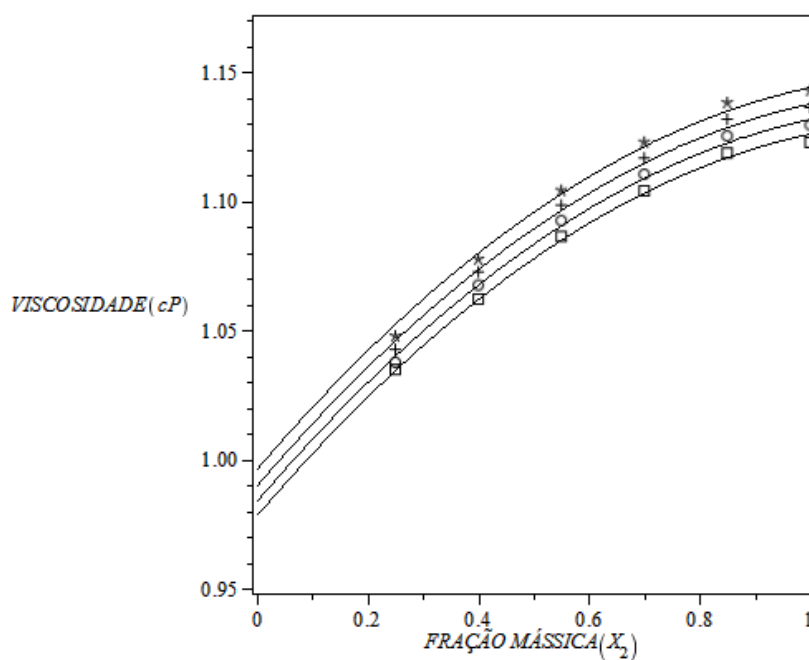


FIGURA 53 - COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS COM O MODELO PROPOSTO (-) PARA A MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAB(2), PARA AS SEGUINTE TEMPERATURAS: (\*) 293,15 K, (+) 303,15 K, (o) 313,15 K E (□) 323,15 K. FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

ÁGUA(1) + 2HDEAB(2)

$$\rho = 0.8033 - 0.1101X_2^2 + 0.2208X_2 + \frac{57.0564}{T} \quad (38)$$

$$R^2 = 0.9958$$

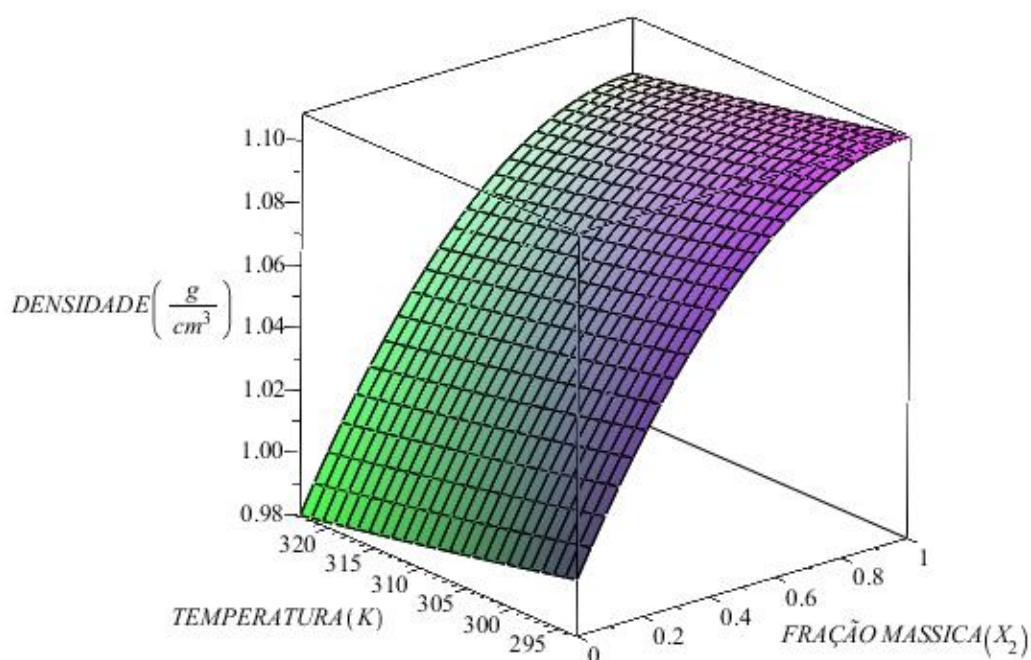


FIGURA 54 - DENSIDADE (g/cm³) PARA A MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAB(2) EM FUNÇÃO DA FRAÇÃO MÁSSICA (X2) E DA TEMPERATURA (K) FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

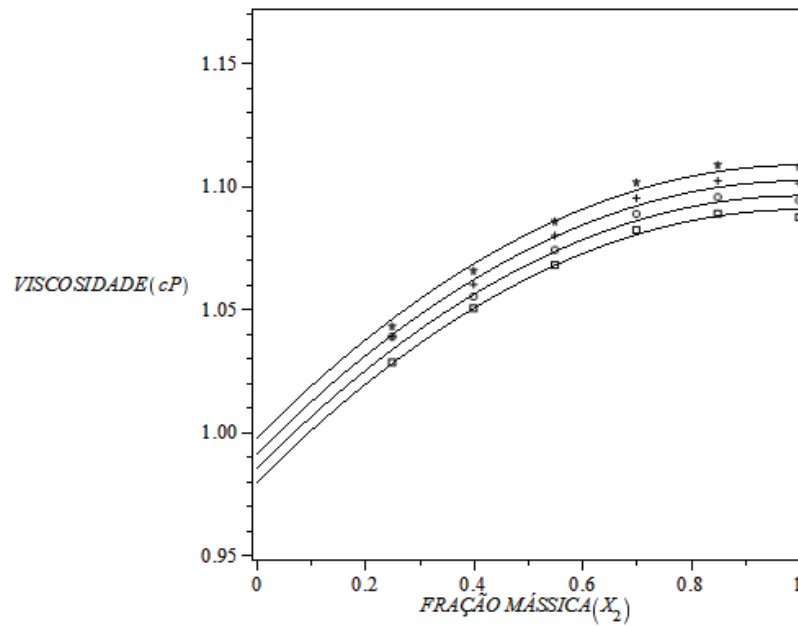


FIGURA 55 - COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS COM O MODELO PROPOSTO (-) PARA A MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAB(2), PARA AS SEGUINTE TEMPERATURAS: (\*) 293,15 K, (+) 303,15 K, (o) 313,15 K E (□) 323,15 K.  
FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

ÁGUA(1) + 2HDEAPe(2)

$$\rho = 0.8014 - 0.0947X_2^2 + 0.1686X_2 + \frac{58.1555}{T} \quad (39)$$

$$R^2 = 0.9973$$

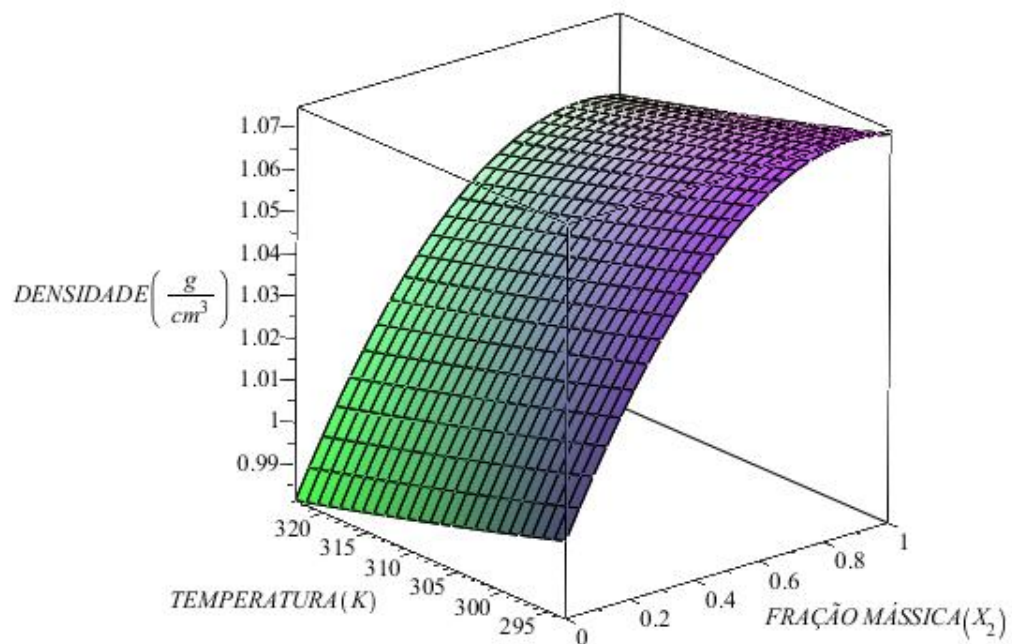


FIGURA 56 - DENSIDADE (cP) PARA A MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAPe(2) EM FUNÇÃO DA FRAÇÃO MÁSSICA (X2) E DA TEMPERATURA (K)  
FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.



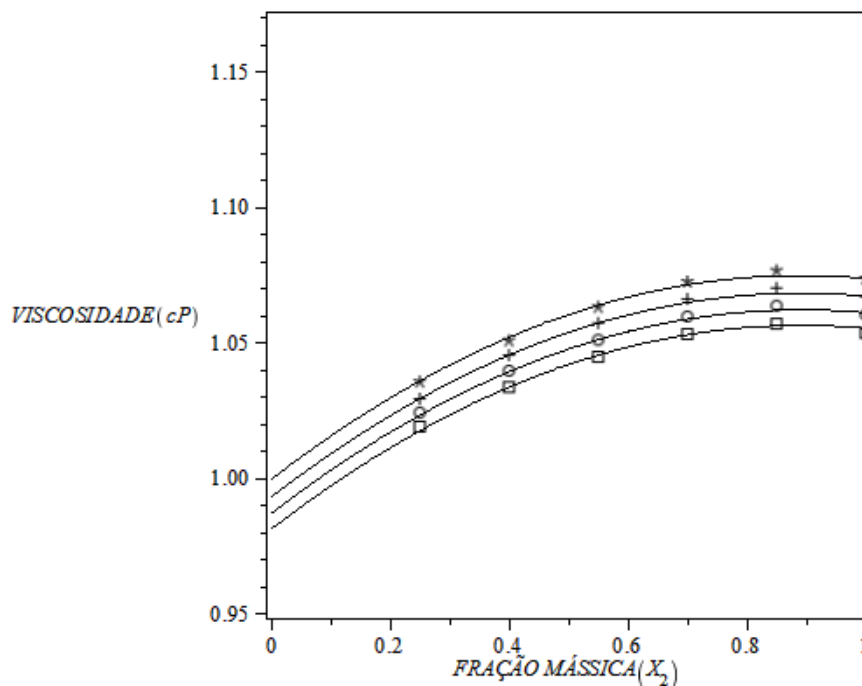


FIGURA 57 - COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS COM O MODELO PROPOSTO (-) PARA A MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAPe(2), PARA AS SEGUINTE TEMPERATURAS: (\*) 293,15 K, (+) 303,15 K, (o) 313,15 K E (□) 323,15 K. FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

Através do modelo é possível definir para a mistura água(1) + 2HDEAA(2) uma densidade máxima para  $X_2$  igual a 0.8899.

O LI 2HDEAPe puro apresenta a densidade de 1.070 g/cm<sup>3</sup> na temperatura de 298.15 K, enquanto Iglesias et al (2010) relata uma densidade de 1.073 g/cm<sup>3</sup> nesta mesma temperatura.

## 5.5 ELEVAÇÃO DO PONTO DE EBULIÇÃO

### 5.5.1 Líquidos iônicos

Dados sobre a elevação do ponto de ebulição (EPE) para mistura binária: água + LI são escassos na literatura, desta forma a discussão foi realizada sobre os quatro LIs utilizados neste trabalho.

Os resultados obtidos não são conclusivos para se determinar a influência da estrutura do LI na EPE. Entretanto, sabe-se que o LI com maior cadeia aniônica apresenta a menor EPE, neste caso o 2HDEAPe, de acordo com a Figura 58.

Os resultados obtidos para o 2HDEAA e 2HDEAB são semelhantes, enquanto o 2HDEAPR apresenta a maior EPE.

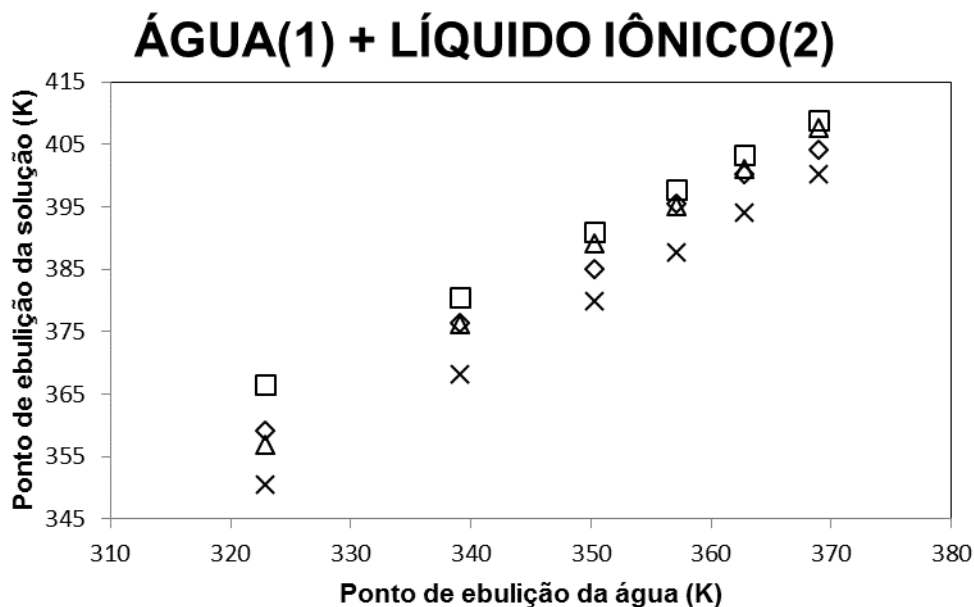


FIGURA 58 - ELEVAÇÃO DO PONTO DE EBULIÇÃO DA SOLUÇÃO ÁGUA(1) + LÍQUIDO IÔNICO(2) EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA DE EBULIÇÃO DA ÁGUA PURA (DIAGRAMA DE DUHRING) PARA  $x_1=0,05$  : (◇) 2HDEAA, (□) 2HDEAPR, (Δ) 2HDEAB, (X) 2HDEAPR  
FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

Os quatro LIs apresentam a mesma tendência de comportamento, conforme aumenta a quantidade de LI na mistura, maior é a temperatura de ebulição da água.

A mistura água(1) + 2HDEAPe(2) apresenta uma particularidade em relação aos demais LIs. Quando  $x_2=0,85$  a temperatura de ebulição é praticamente idêntica a temperatura encontrada quando  $x_2=0,9$ , quando trabalhado próximo a pressão de 741 mBar. O mesmo se repete na pressão de 918 mBar (Figura 62)

Lembrando que o 2HDEAPe quando misturado com água apresentou uma densidade máxima na fração mássica de 0,85 e agora observa-se uma especificidade deste LI na mesma concentração de 0,85, pode-se dizer que os dois fatos estão relacionados.

## ÁGUA(1) + 2HDEAA(2)

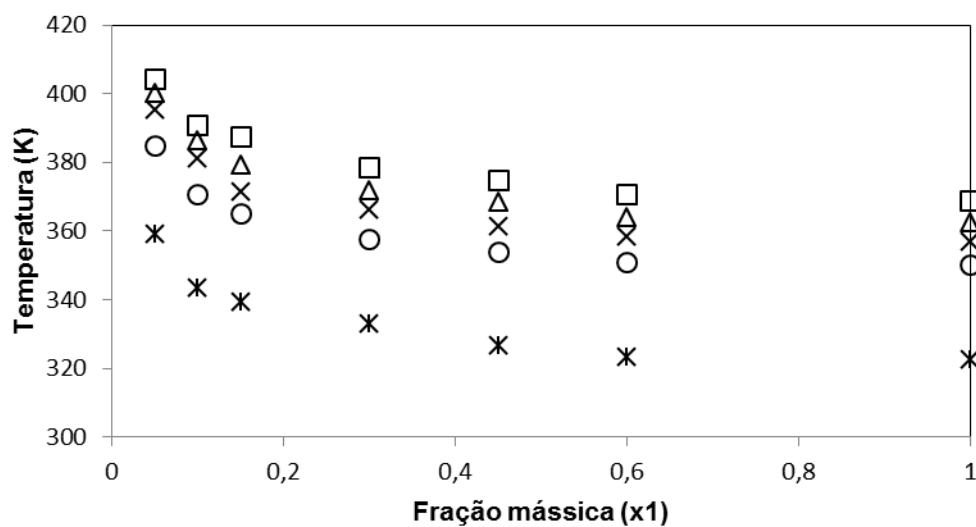


FIGURA 59 - TEMPERATURA DE EBULIÇÃO DA MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAA(2) NAS PRESSÕES DE: (\*) 121 mBar, (+) 258 mBar, (O) 418 mBar, (X) 579 mBar, (Δ) 741 mBar E (□) 918 mBar

FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

## ÁGUA(1) + 2HDEAPR(2)

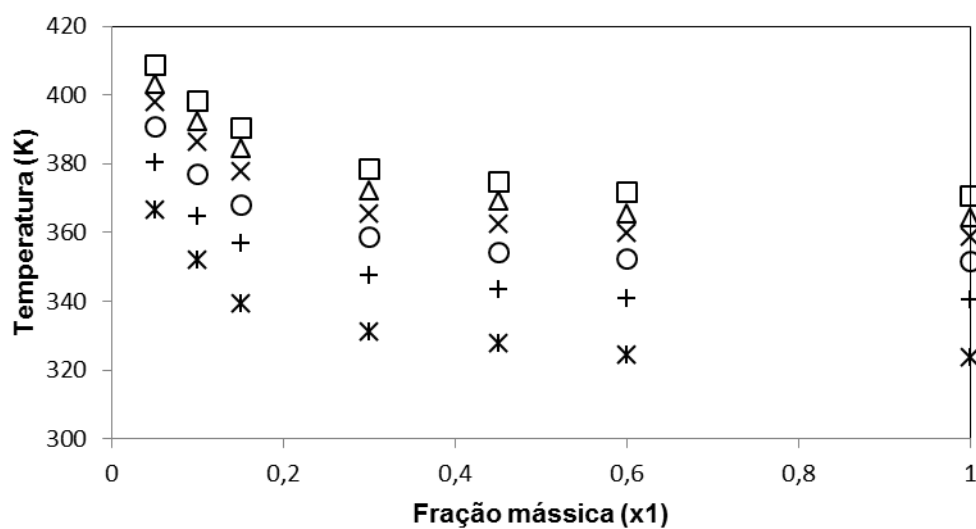


FIGURA 60 - TEMPERATURA DE EBULIÇÃO DA MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAPR(2) NAS PRESSÕES DE: (\*) 121 mBar, (+) 258 mBar, (O) 418 mBar, (X) 579 mBar, (Δ) 741 mBar E (□) 918 mBar

FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

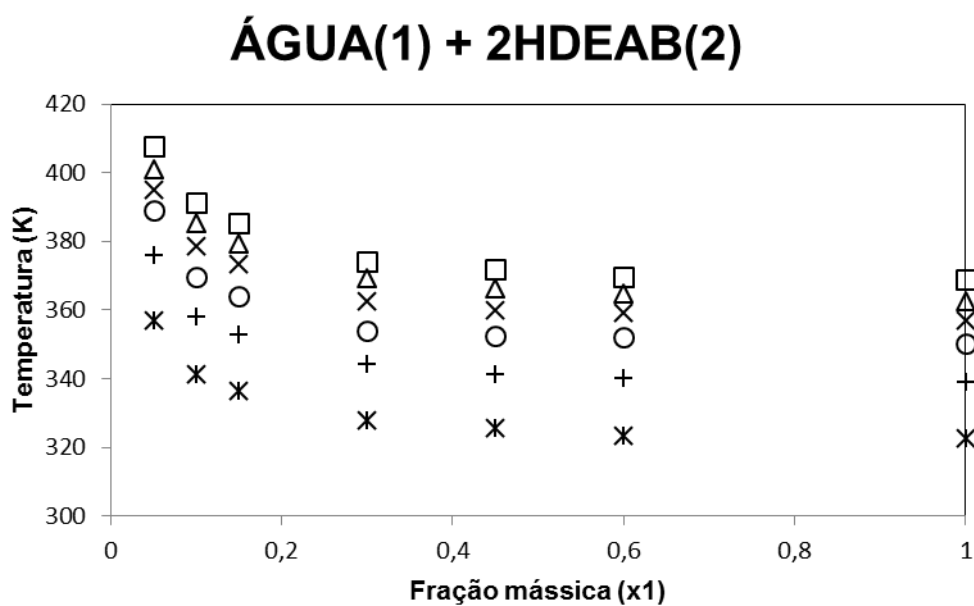


FIGURA 61 - TEMPERATURA DE EBULIÇÃO DA MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAB(2) NAS PRESSÕES DE: (\*) 121 mBar, (+) 258 mBar, (O) 418 mBar, (X) 579 mBar, (Δ) 741 mBar E (□) 918 mBar  
 FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

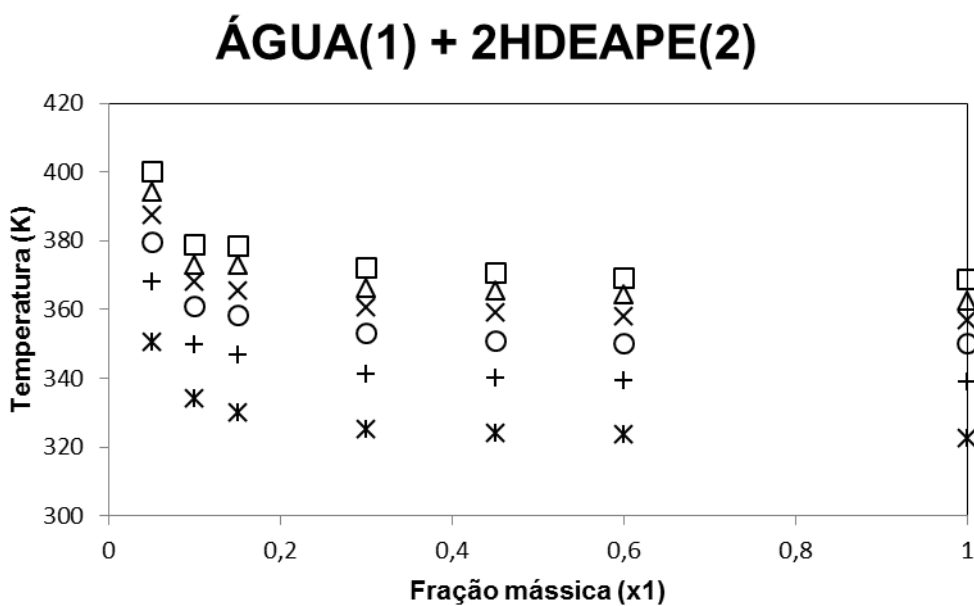


FIGURA 62 - TEMPERATURA DE EBULIÇÃO DA MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAPE(2) NAS PRESSÕES DE: (\*) 121 mBar, (+) 258 mBar, (O) 418 mBar, (X) 579 mBar, (Δ) 741 mBar E (□) 918 mBar  
 FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

Nos diagramas de Duhring abaixo (Figuras 63 a 66) observa-se o comportamento linear para cada faixa de concentração estudada. Quanto maior a concentração de LI na mistura maior é o coeficiente linear.

### ÁGUA(1) + 2HDEAA(2)

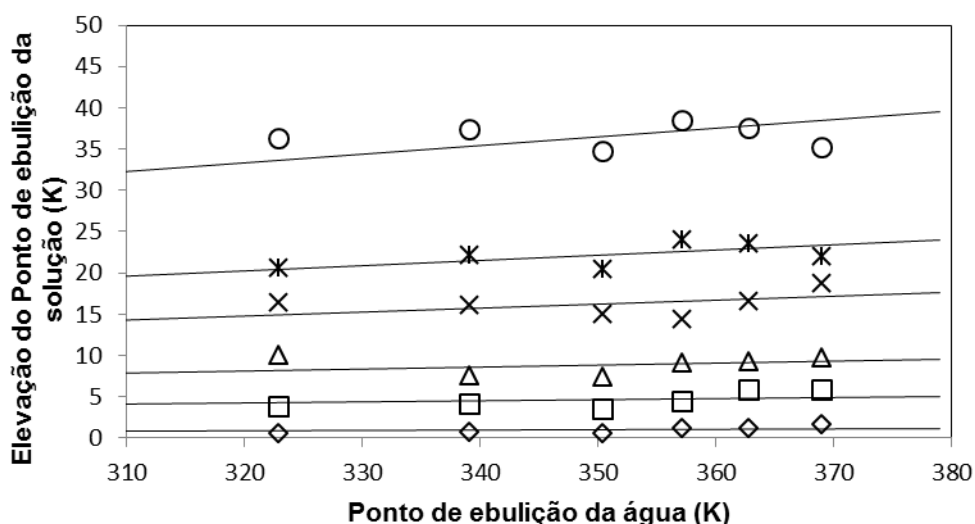


FIGURA 63 - DIAGRAMA DE DUHRING DA MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAA(2):  
(O)  $X_2=0.95$ , ( $\ast$ )  $X_2=0.9$ , (X)  $X_2=0.85$ , ( $\Delta$ )  $X_2=0.70$ , ( $\square$ )  $X_2=0.55$ , ( $\diamond$ )  $X_2=0.40$   
FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

### ÁGUA(1) + 2HDEAPR(2)

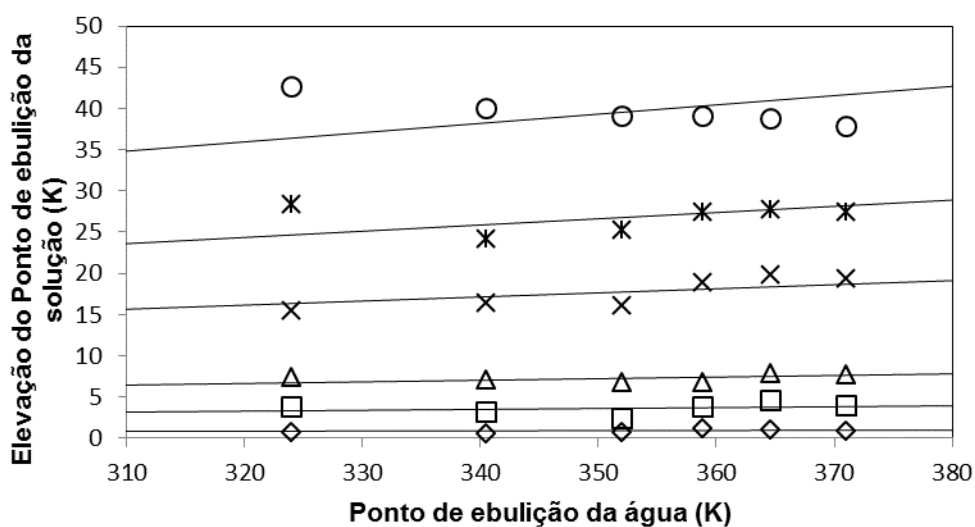


FIGURA 21 - DIAGRAMA DE DUHRING DA MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAPR(2):  
(O)  $X_2=0.95$ , ( $\ast$ )  $X_2=0.9$ , (X)  $X_2=0.85$ , ( $\Delta$ )  $X_2=0.70$ , ( $\square$ )  $X_2=0.55$ , ( $\diamond$ )  $X_2=0.40$   
FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

## ÁGUA(1) + 2HDEAB(2)

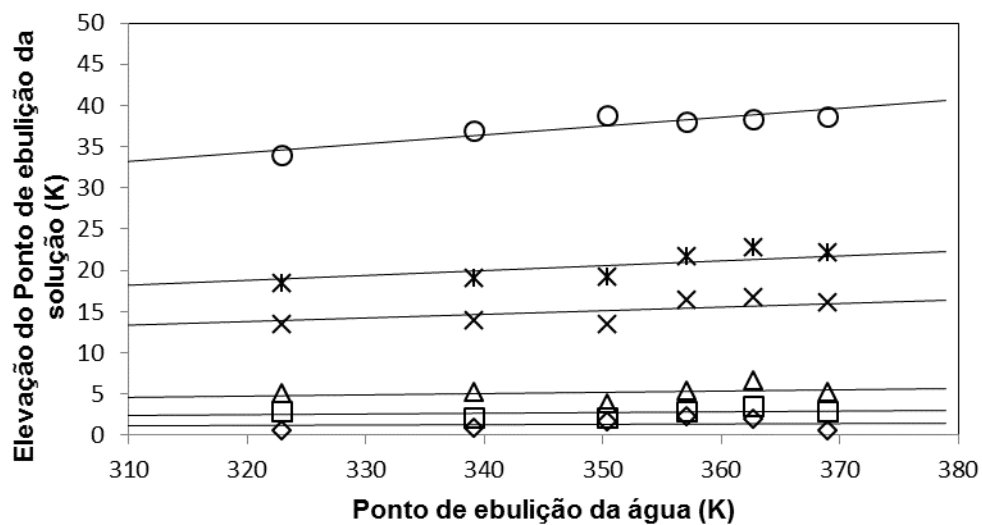


FIGURA 22 - DIAGRAMA DE DUHRING DA MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAB(2):  
 (O)  $X_2=0.95$ , (ж)  $X_2=0.9$ , (X)  $X_2=0.85$ , ( $\Delta$ )  $X_2=0.70$ , ( $\square$ )  $X_2=0.55$ , ( $\diamond$ )  $X_2=0.40$   
 FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

## ÁGUA(1) + 2HDEAPE(2)

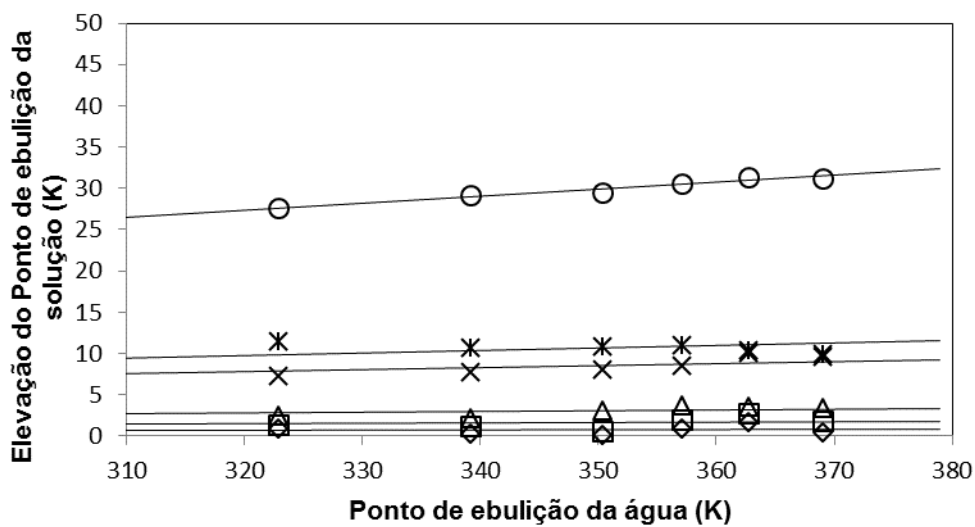


FIGURA 23 - DIAGRAMA DE DUHRING DA MISTURA BINÁRIA ÁGUA(1) + 2HDEAPE(2):  
 (O)  $X_2=0.95$ , (ж)  $X_2=0.9$ , (X)  $X_2=0.85$ , ( $\Delta$ )  $X_2=0.70$ , ( $\square$ )  $X_2=0.55$ , ( $\diamond$ )  $X_2=0.40$   
 FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

### 5.5.2 Modelagem da elevação do ponto de bolha de soluções de água e líquido iônico

A Tabela 19, juntamente com as Figuras 67 a 70, evidenciam um bom ajuste do modelo NRTL.

TABELA 19 – PARÂMETROS PARA AJUSTE DO MODELO NRTL, AJUSTE GLOBAL NA FAIXA DE TEMPERATURA DE 293.15 A 323.15 K, COM 42 PONTOS EXPERIMENTAIS.

LI	$\alpha_{12}$	$\Delta g_{12}$	$\Delta g_{21}$	Erro
2HDEAA	0,2	-765,725	2966,199	2,07
2HDEAPr	0,2	1177,796	-1036,519	2,58
2HDEAB	0,2	1336,507	-973,549	1,20
2HDEAPe	0,2	1933,309	-978,430	1,63

O erro foi calculado por:

$$RMSD(K) = \sqrt{\frac{\sum_n^{NEXP} (T_n^{calc} - T_n^{exp})^2}{NEXP}} \quad (40)$$

onde NEXP é o número de pontos experimentais,  $T_n^{calc}$  é a temperatura de ebulição calculada no ponto n,  $T_n^{exp}$  é a temperatura experimental no ponto n, n é o ponto experimental definido pela pressão e fração mássica.

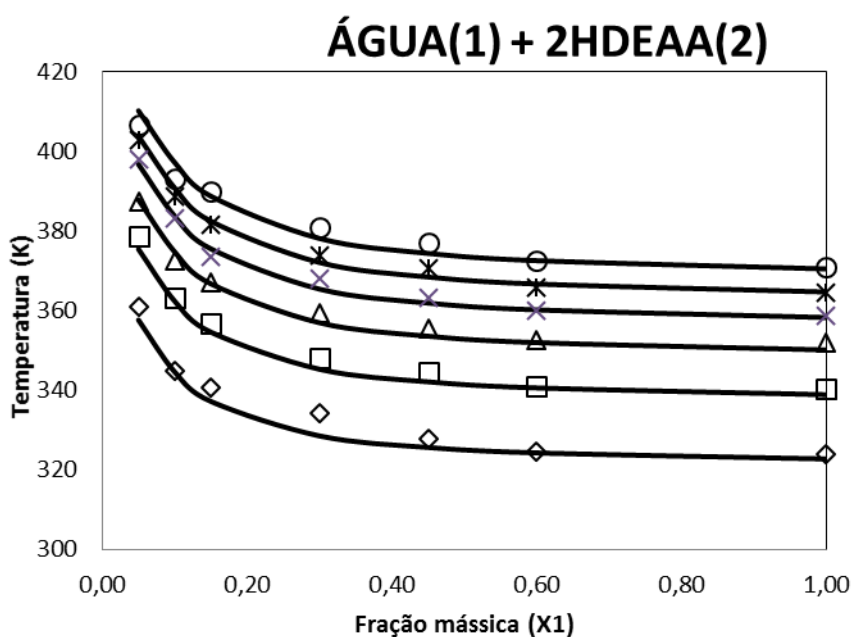


FIGURA 24 - COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS DO PONTO DE EBULIÇÃO DA MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAA(2) E MODELOS NRTL, PARA AS PRESSÕES: (◇) 121 mBar, (□) 258 mBar, (Δ) 418 mBar, (X) 579 mBar, (⋈) 741 mBar E (O) 918 mBar. FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

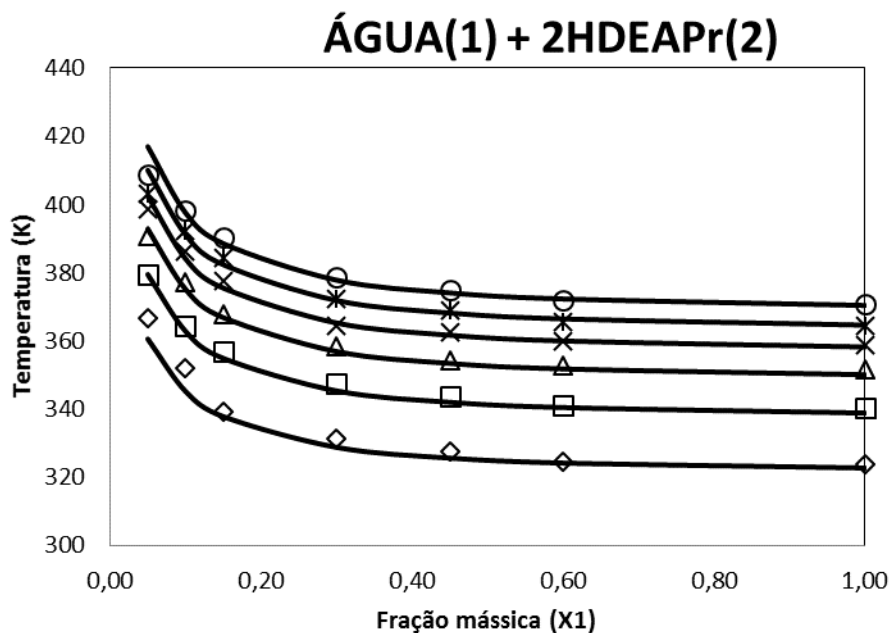


FIGURA 25 - COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS DO PONTO DE EBULIÇÃO DA MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAPr(2) E MODELOS NRTL, PARA AS PRESSÕES: (◇) 121 mBar, (□) 258 mBar, (Δ) 418 mBar, (X) 579 mBar, (✕) 741 mBar E (O) 918 mBar.  
FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

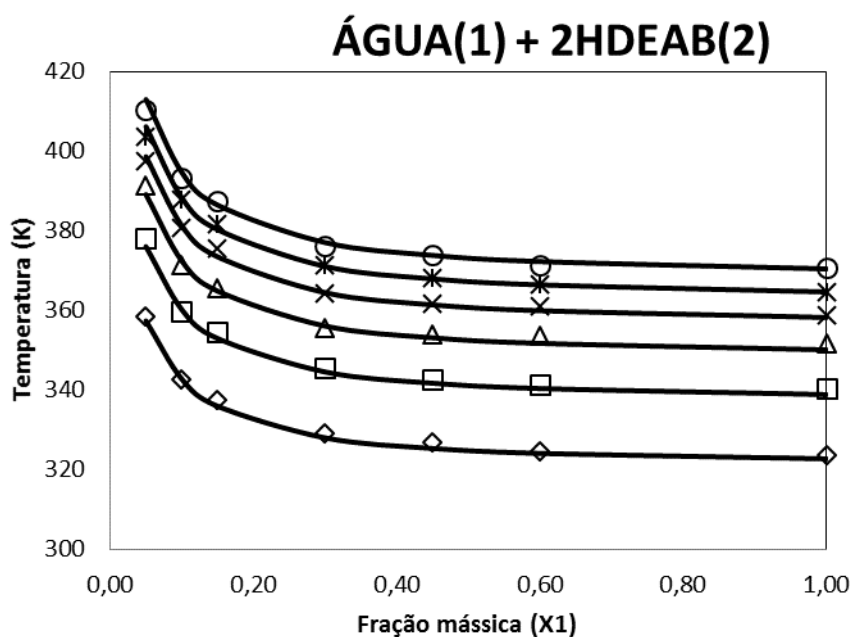


FIGURA 69 - COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS DO PONTO DE EBULIÇÃO DA MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAB(2) E MODELOS NRTL, PARA AS PRESSÕES: (◇) 121 mBar, (□) 258 mBar, (Δ) 418 mBar, (X) 579 mBar, (✕) 741 mBar E (O) 918 mBar.  
FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.



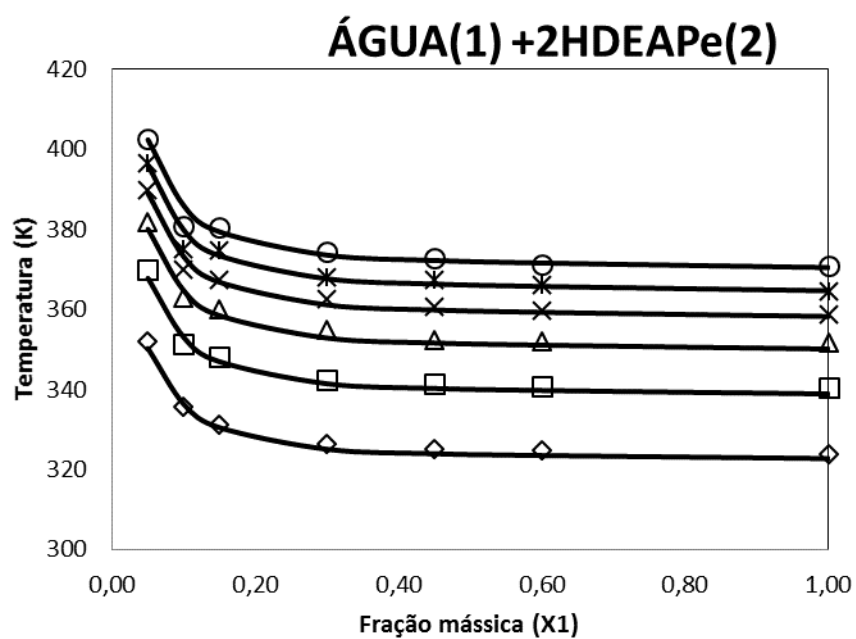


FIGURA 70 - COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS DO PONTO DE EBULIÇÃO DA MISTURA ÁGUA(1) + 2HDEAPe(2) E MODELOS NRTL, PARA AS PRESSÕES: (◇) 121 mBar, (□) 258 mBar, (Δ) 418 mBar, (X) 579 mBar, (⌘) 741 mBar E (○) 918 mBar.  
 FONTE: ELABORADO PELO AUTOR.

## CONCLUSÃO

Este trabalho procurou estudar de forma ampla os Líquidos Iônicos derivados da base Dietanolamina com variação da cadeia aniônica. A partir de amostras sintetizadas pela UEM foram analisadas algumas propriedades físico-químicas e feito a modelagem destas propriedades.

Considerando os objetivos propostos no presente estudo, concluem-se as seguintes premissas:

- A viscosidade diminui com o aumento da cadeia aniônica. Sendo o 2HDEAA o mais viscoso e o 2HDEAPe o menos viscoso. No entanto não é possível uma análise mais conclusiva sobre a influência do tamanho da cadeia catiônica na viscosidade, para as bases aniônicas estudadas.
- Os quatro LIs apresentam comportamento semelhante quando adicionado água ao sistema. A adição de apenas 15% de água ao LI puro ocasiona uma redução de aproximadamente 90% no valor da viscosidade. Verifica-se também que acima de 323,15 K os 04 LIs apresentam viscosidades relativamente próximas entre si.
- A densidade diminui com o aumento da cadeia aniônica enquanto aumenta com o aumento da cadeia catiônica sendo o 2HDEAA o mais denso e o 2HDEAPe o menos denso.
- A densidade aumenta com o aumento da fração mássica de LI, sendo a densidade máxima obtida para os LIs puros, com exceção do LI 2HDEAPe, onde a densidade máxima ocorre à uma fração mássica de LI inferior a 1.
- Os resultados de ponto de bolha obtidos não são conclusivos para se determinar a influência da estrutura do LI na EPE. Entretanto, o LI com maior cadeia aniônica apresentou a menor EPE, em todas as pressões estudadas, neste caso o 2HDEAPe.
- Os resultados obtidos para o 2HDEAA e 2HDEAB são semelhantes, enquanto o 2HDEAPR apresenta a maior EPE.
- Conforme observado para a densidade, o 2HDEAPe também apresenta um comportamento distinto dos demais LI, no ponto de bolha da mistura para

frações entre 0,85 e 0,90. Nesta faixa de fração, os pontos de bolha obtidos para as pressões 741 mBar e 918 mBar são praticamente idênticos.

- Diagramas de Duhring evidenciam o comportamento linear para cada faixa de fração estudada. Quanto maior a fração de LI na mistura maior é o coeficiente linear. O 2HDEAPe apresenta comportamento não linear para a fração de 0,85.
- Os resultados obtidos foram bastante satisfatórios, já que os modelos propostos para viscosidade, densidade e ponto de bolha foram capazes de descrever adequadamente a mistura de água com os 04 LIs estudados.

## REFERENCIAS

AICHINGER, Ernesto Christiano; BACH, Sigurd Walter; MOREIRA, Daisy de Rezende. **Química 3: Físico-química**. São Paulo: Editora Pedagógica e Universitária Ltda, 1980.

AKI, Sudhir N.v.k.; BRENNECKE, Joan F.. How polar are room-temperature ionic liquids? **Chem Comm.** Usa, p. 413-414. fev. 2001.

ALVAREZ, V.h.; MATEDDI, S.; AZNAR, M.. Density, refraction index and vapor-liquid equilibria of N-methyl-2-hydroxyethylammonium butyrate pl. **J. Chem. Thermodynamics**. Edmonton, p. 130-141. mar. 2013.

ALVAREZ, Victor H. et al. Vapor-liquid and liquid-liquid equilibrium for binary systems ester + a new protic ionic liquid. **Ionics**. Campinas, p. 1263-1269. jan. 2013.

ALVAREZ, Victor H.; AZNAR, Martin. Thermodynamic modeling of vapor-liquid equilibrium of binary systems ionic liquid + supercritical {CO<sub>2</sub> or CHF<sub>3</sub>} and ionic liquid + hydrocarbons using Peng-Robinson equation of state. **Journal Of The Chinese Institute Of Chemical Engineers**. Campinas, p. 353-360. fev. 2008.

ALVAREZ, Victor Hugo Alvarez. **Termodinâmica e aplicações de líquidos iônicos**. 2010. 382 f. Tese (Doutorado) - Curso de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2010.

ANASTAS, Paul; EGHBALI, Nicolas. Green Chemistry: principles and practice. **Chemical Society Reviews**, Usa, v. 39, n. 1, p.301-312, nov. 2010.

ANDRADE, Carlos Kleber Z.. Solventes alternativos. In: CORREA, Arlene Golçalves; ZUIN, Vânia G.. **Química verde: fundamentos e aplicações**. São Carlos: Edufscar, 2009. Cap. 2. p. 23-60.

BILLARD, I. et al. In silico design of new ionic liquids based on quantitative structure - property relationship models of ionic liquid viscosity. **J. Phys. Chem.**. France, p. 93-98. jan. 2011.

BLACKADDER, D.a.; NEDDERMAN, R.m.. **Manual de Operações Unitárias**. London: Hemus, 2004.

CASTIER, M. XSEOS Thermodynamic Properties using Excess Gibbs Free Energy Models and Equations of State, 2008.

CLARK, James H.; TAVENER, Stewart J.. Alternative Solvents: Shades of Green. **Organic Process Research & Development**. New York, p. 149-155. dez. 2007.

COTA, I. et al. New short aliphatic chain ionic liquids: synthesis, physical properties, and catalytic activity in aldol condensations. **J. Phys. Chem.** Spain, p. 12468-12477. jul. 2007.

CROSCATO, Gilson dos Santos. **Medidas de solubilidade de corantes têxteis com líquidos iônicos próticos com base cationica metil monoetanolamina**. 2013. 95 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Engenharia Química, Universidade Estadual de Maringá, Maringá, 2013.

DIADEM Public v. 1.2 - DIPPR® - Design Institute for Physical Property Data. Information And Data Evaluation Manager, 2000.

FAGGION, Heron. **Efeito da adição de eletrólitos no equilíbrio líquido-vapor de sistemas presentes na produção de biodiesel via rota etílica**. 2013. 72 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Engenharia de Alimentos, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2013.

GABAS, Ana Lucia; MENEZES, Rafael Silva; TELIS-ROMERO, Javier. **Reologia na indústria de biocombustíveis**. Lavras: Indi, 2012. 156 p.

GOVINDA, Varadhi et al. Influence of anion on thermophysical properties of ionic liquids with polar solvent. **J. Chem. Thermodynamics**. India, p. 269-278. jan. 2013.

GOVINDA, Varadhi et al. Temperature effect on the molecular interactions between two ammonium ionic liquids and dimethylsulfoxide. **Journal Of Molecular Liquids**. Tirupati, p. 218-225. out. 2011.

GREAVES, Tamar L.; DRUMMOND, Calum J.. Protic Ionic Liquids: Properties and Applications. **Chemical Reviews**, Austrália, v. 108, n. 108, p.206-237, out. 2008.

HOU, Mengyin et al. Thermodynamic properties of aqueous solutions of two ammonium-based protic ionic liquids at 298.15 K. **Journal Of Molecular Liquids**. China, p. 149-155. jan. 2013.

HUDDLESTON, Jonathan G. et al. Room temperature ionic liquids as novel media for 'clean' liquid-liquid. **Chem. Commun**, Usa, v. 1, n. 1, p.1765-1766, maio 1998.

IGLESIAS, M. et al. Bronsted ionic liquids: study of physico-chemical properties and catalytic activity in aldol condensations. **Chemical Engineering Journal**. Spain, p. 802-808. jun. 2010.

IGLESIAS, M. et al. Effect of temperatura on mixing thermodynamics of a new ionic liquid: {2-Hydroxy ethylammonium forma. **J. Chem. Thermodynamics**. Tarragona, p. 119-133. jun. 2008.

J.TELIS-ROMERO et al. Elevation on boiling point of coffee extract. **Brazilian Journal Of Chemical Engineering**. São Paulo, p. 119-126. jan. 2002.

LEMMON, E.W., MCLINDEN, M.O. and FRIEND, D.G., "Thermophysical Properties of Fluid Systems" in **NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database Number 69**, Eds. P.J. Linstrom and W.G. Mallard, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg MD, 20899. Disponível em: <<http://webbook.nist.gov>> acesso em: 4 janeiro 2015.

MATTEDI, Silvana ; CARVALHO, Pedro J. ; COUTINHO, João A.P. ; ALVAREZ, Víctor H. ; Iglesias, Miguel. High pressure CO<sub>2</sub> solubility in N-methyl-2-hydroxyethylammonium protic ionic liquids. **The Journal of Supercritical Fluids**, Vol.56(3), pp.224-230, 2011.

MCCABE, Warren L.; SMITH, Julian C.; HARRIOTT, Peter. **Unit operations of chemical engineering**. Boston: McGraw-Hill, 2005. (McGraw-Hill).

MORAES, Maria Renata. **Medidas de solubilidade de corantes têxteis em líquidos iônicos próticos com base cationica 2-hidroxi trietilamônio**. 2013. 112 f. Tese (Doutorado) - Curso de Engenharia Química, Universidade Estadual de Maringá, Maringá, 2013.

PINKERT, André et al. Density, viscosity and electrical conductivity of protic alkanolammonium ionic liquids. **Phys.chem.chem.phys.** New Zealand, p. 5136-5143. dez. 2011.

PINKERT, André; MARSH, Kenneth N.; PANG, Shusheng. Alkanolamine ionic liquids and their inability to dissolve crystalline cellulose. **Ind.eng.chem.res.** New Zealand, p. 11809-11813. ago. 2011.

PLECHKOVA, Natalia V.; SEDDON, Kenneth R.. Applications of ionic liquids in the chemical industry. **Chemical Society Reviews**, Usa, v. 37, n. 1, p.123-150, jan. 2008.

RENNER, Rebecca. Ionic Liquids: An Industrial Cleanup Solution. **Environmental Science & Technology**, Eua, v. 1, n. 1, p.411-413, out. 2001.

RENON H., PRAUSNITZ J. M., "Local Compositions in Thermodynamic Excess Functions for Liquid Mixtures", *AIChE J.*, 14(1), S.135–144, 1968

RIBEIRO, A.p.c. et al. **Thermal Properties of Ionic Liquids and Ionanofluids: Ionic Liquids: Theory , Properties, New Approaches**. Lisboa: Intech, 2011. 738 p.

RIBEIRO, F.r.g et al. Alternativa sustentável de tingimento têxtil com líquido iônico. In: INTERNATIONAL WORKSHOP ADVANCES IN CLEANER PRODUCTION, 4., 2013, São Paulo. **Academic Work**. São Paulo: International Workshop Advances In Cleaner Production, 2013. p. 1 - 9.

RODRIGUES, Flavio Thihara. **Diagramas experimentais de temperatura de ebulição e entalpia de soluções de extrato solúvel de erva-mate para modelagem e simulação do processo de concentração de sólidos por evaporação**. 2010. 83 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Engenharia de Alimentos, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2010.

ROGERS, Robin D.; SEDDON, Kenneth R.. Ionic liquids - Solvents of the future? **Science**, Usa, v. 302, n. 1, p.792-793, out. 2003.

SEOUD, Omar A. El et al. Applications of Ionic Liquids in Carbohydrate Chemistry: A Window of Opportunities. **Biomacromolecules**, São Paulo, v. 8, n. 9, p.2629-2647, nov. 2007.

STRACKE, Marcelo Paulo. **Líquidos iônicos: síntese, caracterização, utilização como reservatórios moleculares de hidrogênio e aplicação em baterias**. 2008. 194 f. Tese (Doutorado) - Curso de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2008.

VASCONCELOS, Stanley N.s.; PIZZUTI, Lucas. Síntese do líquido iônico Hexafluorofosfato de 1-butil-3-metilimidazólio [BMIM][PF<sub>6</sub>]. **Ceciliana**, São Paulo, v. 1, n. 1, p.90-93, dez. 2012.

VEREVKIN, Sergey P. et al. New for old. Password to the thermodynamics of the protic ionic liquids. **Phys.chem.chem.phys.** Germany, p. 12708-12711. abr. 2011.

WASSERSCHIED, Peter; KEIM, Wilhelm. Ionic liquids - new "solutions" for transition metal catalysis. **Angew.chem.int.**. Germany, p. 3772-3789. jan. 2000.

WESTPHALEN, Denis Libert. **Cálculo da Elevação do Ponto de Ebulição de Soluções a partir de Dados de Pressão Parcial**. Disponível em: <<http://www.hottopos.com.br/regeq6/denis.htm>>. Acesso em: 07 nov. 2013.

WIDEGREN, J.a.; LAESECKE, A.; J.W.MAGEE. The effect of dissolved water on the viscosities of hydrophobic room-temperature ionic liquids. **Chemical Communications**. Usa, p. 1610-1612. jan. 2005.

YANG, Qiaolin; DIONYSIOU, Dionysios D.. Photolytic degradation of chlorinated phenols in room temperatura ionic liquids. **Journal Of Photochemistry And Photobiology**. Usa, p. 229-240. mar. 2004.

## ANEXOS

### ANEXO I

RESULTADOS EXPERIMENTAIS DE DENSIDADE PARA A MISTURA GLICEROL(1) + ETANOL(2):

$X_1$	$\rho$ (g/cm <sup>3</sup> )
0	0,783071
0,0677	0,809656
0,1403	0,836408
0,2075	0,860775
0,267	0,883273
0,2959	0,894836
0,3154	0,905643
0,4163	0,948265
0,4988	0,980213
0,5885	1,022607
0,6806	1,068121
0,7497	1,106159
0,8295	1,146781

RESULTADOS EXPERIMENTAIS DE PONTO DE EBULIÇÃO PARA A MISTURA ETANOL(1) + GLICEROL(2):

$X_1$	T (K)
0,97925	348,4767
0,94542	348,8675
0,90002	348,8675
0,80005	350,9192
0,68698	350,7238
0,59974	351,8962
0,50006	353,4594
0,39997	355,3157
0,29964	357,3674
0,19978	362,4478
0,09608	375,1488
0,04618	395,8612



## ANEXO II

VISCOSIDADE EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA E FRAÇÃO MÁSSICA PARA A MISTURA  
 ÁGUA(1) + 2HDEAA(2):

VISCOSIDADE (cP)	TEMPERATURA (K)	X <sub>2</sub>
2,86	293,15	0,25
2,32	303,15	0,25
1,9	313,15	0,25
1,62	323,15	0,25
4,98	293,15	0,4
3,8	303,15	0,4
3,07	313,15	0,4
2,59	323,15	0,4
11,68	293,15	0,55
8,15	303,15	0,55
6,09	313,15	0,55
4,85	323,15	0,55
38,47	293,15	0,7
23,67	303,15	0,7
16,02	313,15	0,7
11,84	323,15	0,7
244,44	293,15	0,85
128,37	303,15	0,85
74,21	313,15	0,85
43,74	323,15	0,85
3586,51	293,15	1
1585,45	303,15	1
684,28	313,15	1
354,84	323,15	1

## ANEXO III

VISCOSIDADE EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA E FRAÇÃO MÁSSICA PARA A MISTURA  
 ÁGUA(1) + 2HDEAPr(2):

VISCOSIDADE (cP)	TEMPERATURA (K)	X <sub>2</sub>
3,01	293,15	0,25
2,44	303,15	0,25
2	313,15	0,25
1,69	323,15	0,25
5,52	293,15	0,4
4,14	303,15	0,4
3,3	313,15	0,4
2,76	323,15	0,4
13,64	293,15	0,55
9,35	303,15	0,55
6,87	313,15	0,55
5,37	323,15	0,55
48,17	293,15	0,7
29,38	303,15	0,7
18,89	313,15	0,7
12,54	323,15	0,7
226,95	293,15	0,85
124,17	303,15	0,85
72,43	313,15	0,85
42,18	323,15	0,85
2489,84	293,15	1
1165,79	303,15	1
518,2	313,15	1
296,48	323,15	1

## ANEXO IV

VISCOSIDADE EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA E FRAÇÃO MÁSSICA PARA A MISTURA  
 ÁGUA(1) + 2HDEAB(2):

VISCOSIDADE (cP)	TEMPERATURA (K)	X <sub>2</sub>
3,08	293,15	0,25
2,41	303,15	0,25
1,99	313,15	0,25
1,7	323,15	0,25
5,67	293,15	0,4
4,19	303,15	0,4
3,27	313,15	0,4
2,67	323,15	0,4
16,68	293,15	0,55
10,81	303,15	0,55
7,47	313,15	0,55
5,49	323,15	0,55
45,14	293,15	0,7
27,92	303,15	0,7
18,56	313,15	0,7
13,38	323,15	0,7
226,98	293,15	0,85
125,8	303,15	0,85
71,99	313,15	0,85
44,73	323,15	0,85
2391,46	293,15	1
1087,9	303,15	1
529,34	313,15	1
292,62	323,15	1

## ANEXO V

VISCOSIDADE EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA E FRAÇÃO MÁSSICA PARA A MISTURA  
 ÁGUA(1) + 2HDEAPe(2):

VISCOSIDADE (cP)	TEMPERATURA (K)	X <sub>2</sub>
3,09	293,15	0,25
2,44	303,15	0,25
2,01	313,15	0,25
1,71	323,15	0,25
6,12	293,15	0,4
4,9	303,15	0,4
3,79	313,15	0,4
3,18	323,15	0,4
17,95	293,15	0,55
11,97	303,15	0,55
8,13	313,15	0,55
5,9	323,15	0,55
37,92	293,15	0,7
24,06	303,15	0,7
19,98	313,15	0,7
12,66	323,15	0,7
146,66	293,15	0,85
83,77	303,15	0,85
52,01	313,15	0,85
34,64	323,15	0,85
1308,76	293,15	1
630,33	303,15	1
341,27	313,15	1
203,25	323,15	1

## ANEXO VI

DENSIDADE EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA E FRAÇÃO MÁSSICA PARA A MISTURA ÁGUA(1)  
+ 2HDEAA(2):

DENSIDADE (g/cm <sup>3</sup> )	TEMPERATURA (K)	X <sub>2</sub>
1,051156	293,15	0,25
1,047606	303,15	0,25
1,043856	313,15	0,25
1,039957	323,15	0,25
1,083899	293,15	0,4
1,079272	303,15	0,4
1,074445	313,15	0,4
1,069466	323,15	0,4
1,115701	293,15	0,55
1,110497	303,15	0,55
1,105102	313,15	0,55
1,099517	323,15	0,55
1,142491	293,15	0,7
1,136826	303,15	0,7
1,131054	313,15	0,7
1,125169	323,15	0,7
1,162374	293,15	0,85
1,156439	303,15	0,85
1,150421	313,15	0,85
1,144347	323,15	0,85
1,177029	293,15	1
1,170753	303,15	1
1,164305	313,15	1
1,157935	323,15	1

## ANEXO VII

DENSIDADE EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA E FRAÇÃO MÁSSICA PARA A MISTURA ÁGUA(1)  
+ 2HDEAPr(2):

DENSIDADE (g/cm <sup>3</sup> )	TEMPERATURA (K)	X <sub>2</sub>
1,047672	293,15	0,25
1,042492	303,15	0,25
1,037511	313,15	0,25
1,034697	323,15	0,25
1,077449	293,15	0,4
1,072488	303,15	0,4
1,067346	313,15	0,4
1,061981	323,15	0,4
1,104081	293,15	0,55
1,098331	303,15	0,55
1,092373	313,15	0,55
1,08621	323,15	0,55
1,122737	293,15	0,7
1,116575	303,15	0,7
1,110281	313,15	0,7
1,103845	323,15	0,7
1,138019	293,15	0,85
1,131612	303,15	0,85
1,125104	313,15	0,85
1,118522	323,15	0,85
1,14278	293,15	1
1,136129	303,15	1
1,129372	313,15	1
1,122638	323,15	1

## ANEXO VIII

DENSIDADE EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA E FRAÇÃO MÁSSICA PARA A MISTURA ÁGUA(1)  
+ 2HDEAB(2):

DENSIDADE (g/cm <sup>3</sup> )	TEMPERATURA (K)	X <sub>2</sub>
1,042733	293,15	0,25
1,03852	303,15	0,25
1,033854	313,15	0,25
1,028102	323,15	0,25
1,065325	293,15	0,4
1,059734	303,15	0,4
1,054831	313,15	0,4
1,050108	323,15	0,4
1,085412	293,15	0,55
1,079663	303,15	0,55
1,073812	313,15	0,55
1,067701	323,15	0,55
1,101218	293,15	0,7
1,094898	303,15	0,7
1,088454	313,15	0,7
1,081881	323,15	0,7
1,108347	293,15	0,85
1,101856	303,15	0,85
1,095247	313,15	0,85
1,088539	323,15	0,85
1,107627	293,15	1
1,100858	303,15	1
1,093977	313,15	1
1,087152	323,15	1

## ANEXO IX

DENSIDADE EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA E FRAÇÃO MÁSSICA PARA A MISTURA ÁGUA(1)  
+ 2HDEAPe(2):

DENSIDADE (g/cm <sup>3</sup> )	TEMPERATURA (K)	X <sub>2</sub>
1,035368	293,15	0,25
1,028971	303,15	0,25
1,023933	313,15	0,25
1,018733	323,15	0,25
1,050589	293,15	0,4
1,045103	303,15	0,4
1,039347	313,15	0,4
1,033309	323,15	0,4
1,062946	293,15	0,55
1,056949	303,15	0,55
1,050735	313,15	0,55
1,044485	323,15	0,55
1,07226	293,15	0,7
1,065852	303,15	0,7
1,059386	313,15	0,7
1,052888	323,15	0,7
1,076375	293,15	0,85
1,069884	303,15	0,85
1,063327	313,15	0,85
1,056693	323,15	0,85
1,075973	293,15	0,9
1,069467	303,15	0,9
1,062852	313,15	0,9
1,056151	323,15	0,9
1,075402	293,15	0,95
1,068898	303,15	0,95
1,062276	313,15	0,95
1,055555	323,15	0,95
1,0733875	293,15	1
1,0666785	303,15	1
1,060025	313,15	1
1,053298	323,15	1



## ANEXO X

PONTO DE EBULIÇÃO EM FUNÇÃO DA PRESSÃO E FRAÇÃO MÁSSICA PARA A MISTURA  
ÁGUA(1) + 2HDEAA(2):

TEMPERATURA (K)	PRESSÃO (mBar)	X <sub>2</sub>
323,5632	121	0,4
339,8791	258	0,4
351,0169	418	0,4
358,3444	579	0,4
363,9133	741	0,4
370,6546	918	0,4
326,6896	121	0,55
343,2986	258	0,55
353,8502	418	0,55
361,5685	579	0,55
368,6029	741	0,55
374,9534	918	0,55
333,0401	121	0,7
346,7181	258	0,7
357,7582	418	0,7
366,1604	579	0,7
372,0224	741	0,7
378,7637	918	0,7
339,3906	121	0,85
355,218	258	0,85
365,3788	418	0,85
371,5339	579	0,85
379,3499	741	0,85
387,7521	918	0,85
343,494	121	0,9
361,3731	258	0,9
370,7523	418	0,9
381,2062	579	0,9
386,3843	741	0,9
390,9992	918	0,9
359,2237	121	0,95
376,4936	258	0,95
385,1372	418	0,95
395,5221	579	0,95
400,3554	741	0,95
404,1657	918	0,95

## ANEXO XI

PONTO DE EBULIÇÃO EM FUNÇÃO DA PRESSÃO E FRAÇÃO MÁSSICA PARA A MISTURA  
ÁGUA(1) + 2HDEAPr(2):

TEMPERATURA (K)	PRESSÃO (mBar)	X <sub>2</sub>
324,5952	121	0,4
341,0457	258	0,4
352,7106	418	0,4
359,9887	579	0,4
365,6716	741	0,4
371,9527	918	0,4
327,7856	121	0,55
343,7376	258	0,55
354,4055	418	0,55
362,6806	579	0,55
369,1611	741	0,55
374,9437	918	0,55
331,2751	121	0,7
347,6259	258	0,7
358,6926	418	0,7
365,6746	579	0,7
372,4512	741	0,7
378,7323	918	0,7
339,3508	121	0,85
356,898	258	0,85
368,0644	418	0,85
377,7353	579	0,85
384,4152	741	0,85
390,3972	918	0,85
352,3118	121	0,9
364,6746	258	0,9
377,2368	418	0,9
386,3095	579	0,9
392,3912	741	0,9
398,3732	918	0,9
366,6686	121	0,95
380,5299	258	0,95
390,9954	418	0,95
397,8717	579	0,95
403,3582	741	0,95
408,8417	918	0,95

## ANEXO XII

PONTO DE EBULIÇÃO EM FUNÇÃO DA PRESSÃO E FRAÇÃO MÁSSICA PARA A MISTURA  
ÁGUA(1) + 2HDEAB(2):

TEMPERATURA (K)	PRESSÃO (mBar)	X <sub>2</sub>
323,5632	121	0,4
340,0745	258	0,4
351,9939	418	0,4
359,4191	579	0,4
364,7926	741	0,4
369,5799	918	0,4
325,8103	121	0,55
341,2469	258	0,55
352,4824	418	0,55
360,0053	579	0,55
366,3558	741	0,55
371,9247	918	0,55
327,9597	121	0,7
344,3733	258	0,7
354,1433	418	0,7
362,4478	579	0,7
369,4822	741	0,7
374,2695	918	0,7
336,3619	121	0,85
353,0686	258	0,85
363,9133	418	0,85
373,4879	579	0,85
379,5453	741	0,85
385,2119	918	0,85
341,3446	121	0,9
358,2467	258	0,9
369,5799	418	0,9
378,7637	579	0,9
385,505	741	0,9
391,1716	918	0,9
356,8789	121	0,95
376,1258	258	0,95
389,1199	418	0,95
395,1773	579	0,95
401,0393	741	0,95
407,6829	918	0,95

## ANEXO XIII

PONTO DE EBULIÇÃO EM FUNÇÃO DA PRESSÃO E FRAÇÃO MÁSSICA PARA A MISTURA  
 ÁGUA(1) + 2HDEAPe(2):

TEMPERATURA (K)	PRESSÃO (mBar)	X <sub>2</sub>
323,8563	121	0,4
339,3906	258	0,4
350,4307	418	0,4
357,9536	579	0,4
364,4018	741	0,4
369,3845	918	0,4
324,2471	121	0,55
340,2699	258	0,55
350,9192	418	0,55
359,126	579	0,55
365,4765	741	0,55
370,85	918	0,55
325,3218	121	0,7
341,2469	258	0,7
353,3617	418	0,7
360,7869	579	0,7
366,3558	741	0,7
372,4132	918	0,7
330,1091	121	0,85
346,8158	258	0,85
358,3444	418	0,85
365,5742	579	0,85
372,9017	741	0,85
378,5683	918	0,85
334,4079	121	0,9
349,8445	258	0,9
361,2754	418	0,9
368,1144	579	0,9
373,0971	741	0,9
378,8844	918	0,9
350,5284	121	0,95
368,2121	258	0,95
379,8384	418	0,95
387,6544	579	0,95
394,1026	741	0,95
400,2577	918	0,95